Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова

Физический факультет

Кафедра физики частиц и космологии

Дискретная теорема Нётер

Курсовая работа
студента 214 группы
Чиркова Владислава Игоревича

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

Москва 2023

Содержание

1 Введение

1.1 Постановка задачи

В данной работе уделяется внимание понятиям квазиимпульса, квазиэнергии и квазимомента импульса. Целью работы является анализ полученных результатов для квазиипульса и применение похожих подходов для рассмотрения квазимомента импульса. Кроме того, требуется рассмотреть существование квазиэнергии для периодического гамильтониана осциллятора с частотой, зависящей от времени. Задачи работы можно сформулировать так:
1. Доказать существование квазимомента импульса для дискретных симметрий (при инвариантности гамильтониана относительно вращения на некоторый угол).
2. Найти оператор и собственные значения оператора квазимомента импульса.
3. Анализ изученного понятия квазиэнергии проводится для доказательства существования квазиэнергии в случае $\omega = \omega(t)$ и $V(x) = l^2\omega^2(t) \cdot (1 - \cos x)$ (требуется найти собственные функции гамильтониана в этом случае и собственные значения).

1.2 Теорема Нётер

Под группой преобразований будем подразумевать совокупность преобразований [8]:

$$\begin{cases} t^* = f_0(t, q_1, \dots, q_n, a_1, \dots, a_r) = f_0(t, q, a), \\ q_i^* = f_i(t, q_1, \dots, q_n, a_1, \dots, a_r) = f_i(t, q, a)(i = 1, 2, \dots, n). \end{cases}$$

Здесь назовём $P^*(t^*, q^*)$ - образ точки $P(t, q)$, а преобразования запишем следующим образом: $T_1 q = q^*, T_1^{-1} q^* = q$. Рассмотрим такие преобразования при условии, что выполняется ассоциативный закон $T_3(T_2T_1) = (T_3T_2)T_1$, существует тождественное преобразование T_0, такое, что $T_0T_1 = T_1T_0 = T_1$, а также существует обратное преобразвание T_1^{-1}, такое, что $T_1T_1^{-1} = T_1^{-1}T_1 = T_0$. Если выполнены эти условия, то говорят, что эти преобразования образуют r-параметрическую группу преобразования G_r, называемую группой Ли.
Требуемые нам теоремы для решения задач теоретической механики можно сформулировать следующим образом.
Пусть задано бесконечно малое преобразование:

$$\begin{cases} t^* = t + \sum\limits_{\alpha=1}^{r} \varepsilon_\alpha \zeta_0^\alpha(t, q, \dot{q}), \\ q_i^*(t^*) = q_i(t) + \sum\limits_{\alpha=1}^{r} \varepsilon_\alpha \zeta_i^\alpha(t, q, \dot{q}) \quad (i = 1, 2, ..., n) \end{cases}$$

для группы Ли G_r. В таком случае, если функции Лагранжа $\mathcal{L}$ и $\mathcal{L}_1$ будет удовлетворять условию:

$$\int\limits_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(t, q, \dot{q}) dt = \int\limits_{t_1^*}^{t_2^*} \mathcal{L}_1(t^*, q^*, \dot{q}^*) dt^*, \tag{1}$$

и позволяют получить одни и те же уравнения движения, то тогда будет существовать ровно r независимых первых интегралов движения уравнения Лагранжа в виде:

$$\mathcal{L} \cdot \zeta_0^\alpha + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \cdot \overline{\zeta}_i^\alpha + \lambda^\alpha = C^\alpha \quad (\alpha = 1, 2, ..., r), \tag{2}$$

где $\overline{\zeta}_i^\alpha := \zeta_i^\alpha - \dot{q}_i \zeta_0^\alpha$.
Доказательство (полное приведено в книге [8]):
Запишем вариацию действия в виде:

$$\Delta I = \int\limits_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha=1}^{r} \varepsilon_\alpha [\frac{d}{dt}(\mathcal{L}\zeta_0^\alpha + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \overline{\zeta}_i^\alpha) - \sum_{i=1}^{n} (\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i}) \overline{\zeta}_i^\alpha] dt, \tag{3}$$

где $\overline{\zeta}_i^\alpha := \zeta_i^\alpha - \dot{q}_i \zeta_0^\alpha$. Пусть интеграл $I = \int\limits_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(t, q, \dot{q}) dt$ инвариантен в смысле (1). Тогда его вариация удовлетворяет условию:

$$\Delta I + \int\limits_{t_1}^{t_2} [\frac{d}{dt} \cdot \Delta\lambda] dt = 0. \tag{4}$$

Заменим ΔI выражением (3). Получим следующее выражение:

$$\int\limits_{t_1}^{t_2} \sum_{\alpha=1}^{r} \varepsilon_\alpha [\frac{d}{dt}(\mathcal{L} \cdot \zeta_0^\alpha + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \cdot \overline{\zeta}_i^\alpha + \lambda^\alpha) - \sum_{i=1}^{n} (\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \cdot - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i}) \overline{\zeta}_i^\alpha] dt = 0. \tag{5}$$

ε_α независимы, а интервал интегрирования берётся произвольно, из чего следует, что вдоль траектории:

$$\frac{d}{dt} [\mathcal{L} \cdot \zeta_0^\alpha + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \cdot \overline{\zeta}_i^\alpha + \lambda^\alpha] = 0 \quad (\alpha = 1, 2, \ldots, r). \tag{6}$$

Из выражения (6) и будет следовать искомое утверждение:

$$\mathcal{L} \cdot \zeta_0^\alpha + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \cdot \overline{\zeta}_i^\alpha + \lambda^\alpha = C^\alpha \quad (\alpha = 1, 2, \ldots, r). \tag{7}$$

Таким образом, получили r линейно независимых первых интегралов уравнения Лагранжа $\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0$. Теорема Нётер доказана.
Важнейшими следствиями из теоремы Нётер являются законы сохранения. В классической механике законы сохранения энергии, импульса и момента импульса выводятся из однородности/изотропности лагранжиана системы — функция Лагранжа не меняется со временем сама по себе и не изменяется переносом или поворотом системы в пространстве (непрерывные симметрии). В сущности, это будет означает то, что при рассмотрении некоторой замкнутой системв в лаборатории будут получены одни и те же результаты вне зависимости от её расположения и от времени проведения эксперимента. Если существуют другие симметрии лагранжиана системы, то они могут соответствовать и другим сохраняющимся в данной системе величинам (интегралам движения).

2 Основные понятия и модельные задачи

2.1 Квазиимпульс. Теорема Блоха

Начать следует с того, что можно разделить все симметрии на две категории: пространственные симметрии и временные симметрии. К первым будут относиться величины, связанные с импульсом и моментом импульса, а ко вторым - с энергией. Начать можно с квазиимпульса и с модельной задачи на введение понятия квазиимпульса, где мы рассматриваем трансляцию не на произвольный вектор, а на конкретный вектор (или на его линейную комбинацию с целыми коэффициентами).

Ионы в идеальном кристалле расположены таким образом, что образуют регулярную периодическую структуру, поэтому необходимо рассмотреть задачу о частице в потенциале $U(r)$, который имеет периодичность решётка Бравэ, то есть имеется набор элементарных трансляций, с помощью которых может быть получена вся бесконечная кристаллическая решётка (в случае электрона в атоме). Потенциал периодический, то есть: $U(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = U(\mathbf{r})$. Обычный импульс сохраняется в том случае, когда потенциал инвариантен относительно трансляции на любой вектор. Вообще квазивеличины возникают в том случае, когда имеются дискретные симметрии, то есть квазиимпульс существует, когда потенциал инвариантен относительно трансляции на линейную комбинацию определённого вектора, называемого вектором решётки. Нам необходимо изучить общие свойства одночастичного уравнения Шрёдингера:

$$H\Psi = (-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}))\Psi = E\Psi, \tag{8}$$

обусловленные периодичностью потенциала U. Из его периодичности вытекает следующее свойство стационарных состояний рассматриваемых нами частиц, называемое **Теоремой Блоха**:

Собственные состояния ψ одночастичного гамильтониана $H = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + U(\mathbf{r})$ при всех $\mathbf{R}$ из решётки Бравэ, могут быть выбраны с учётом периодического потенциала $U(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = U(\mathbf{r})$ таким образом, что их волновые функции будут представлять собой плоскую волну, умноженную на периодическую функцию с периодичностью решётки Бравэ [3], [7]. Математически это можно записать так:

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{kr}}u_{nk}(\mathbf{r}), \tag{9}$$

где функции u_{nk} - периодичны и могут быть записаны следующим образом:

$$u_{nk}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = u_{nk}(\mathbf{r}). \tag{10}$$

Волновые функции в виде (10) называют функциями Блоха. Однако стоит отметить, что амплитуды ψ_{nk} (9) являются плоскими волнами из-за члена $e^{i\mathbf{kr}}$, то

есть периодическими функциями не будут.
Из выражений выше также может следовать равенство:

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}\psi_{nk}(\mathbf{r}), \tag{11}$$

Альтернативная формулировка: Собственные состояния Ψ оператора H можно выбрать таким образом, чтобы с каждым из них был связан некоторый волновой вектор $\mathbf{k}$, и для любого вектора $\mathbf{R}$ в решётке Бравэ выполнялось следующее равенство:

$$\Psi(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}\Psi(\mathbf{r}). \tag{12}$$

2.2 Квазиэнергия системы, подвергающейся периодическому воздействию

Перейдём к рассмотрению временных симметрий, то есть трансляций на некоторый промежуток времени. Если этот промежуток времени произволен, то мы говорим о законе сохранения энергии, если же это справедливо только для определённых промежутков времени (так называемых периодов), то можно говорить о следующей модельной задаче.

Рассмотрим квантовую систему, на которую будет действовать периодически меняющаяся во времени сила. Предположим, что гамильтониан представляет собой сумму слагаемого, не зависящего от времени (H_0), и зависящего от времени (H_1). Если зависящее от времени слагаемое не много меньше, чем сам гамильтониан, то нельзя будет воспользоваться теорией возмущения.

Из групповых соображений для гамильтониана вида $H = H_0 + H_1$, периодически зависящего от времени в виде $H(t+T) = H(t)$, выберем среди всех решений уравнения Шрёдингера:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi \tag{13}$$

такие волновые функции $\Psi_\alpha(t)$, что будет выполняться соотношение:

$$\Psi_\alpha(t+T) = \Psi_\alpha(t)\cdot e^{-i\alpha}. \tag{14}$$

Так как выбор самих функций напоминает выбор функций теоремы Блоха, то будет естественно назвать квазиэнергией величину [4]:

$$\varepsilon = \frac{\hbar\alpha}{T}, \quad T = \frac{2\pi}{\omega}. \tag{15}$$

Квазиэнергия будет возникать в том случае, когда имеет место трансляция по времени на период T. Выберем для анализа волновую функцию с какой-то квазиэнергией ε (пусть она будет периодической). Запишем её в виде:

$$\Psi_\varepsilon(x,t) = u_\epsilon(x,t)\cdot e^{-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}}, \quad u_\varepsilon(x,t+T) = u_\varepsilon(x,t). \tag{16}$$

Отсюда следует, что для разных квазиэнергий $\varepsilon_2 - \varepsilon_1 \neq m\hbar\omega$ ортогональность волновых функций этих двух состояний есть условие независимости от времени t. В противном же случае суперпозиция двух таких решений есть решение с той же квазиэнергией (определённой с точностью до аддитивной постоянной $m\hbar\omega$).

Перейдём к практическому применению рассмотренной теории. Классическая задача - задача об осцилляторе. Рассмотрим осциллятор с постоянной частотой с действующей внешней силой $f(t)$:

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + [\frac{1}{2}\omega_0^2\cdot x^2 - f(t)x]\cdot\Psi, \quad f(t+T) = f(t). \tag{17}$$

Решение (спектр энергий) имеет вид, полученный в [4]:

$$\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2}) \cdot \omega_0 - \frac{1}{2T} \int\limits_0^T f(t)\eta(t)dt, \tag{18}$$

где $\eta(t)$ выражается в следующем виде. Решаем уравнние Шрёдингера для осциллятора с переменной частотой $\omega(t)$, на который действует сила $f(t)$:

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + [\frac{1}{2}\omega^2(t)x^2 - f(t)x]\psi. \tag{19}$$

Сделаем подстановку Хусими:

$$\psi(x,t) = e^{i(\dot{\eta}x_1 + \sigma(t))}\phi(x_1,t), \quad x_1 = x - \eta(t), \tag{20}$$

где $\eta(t), \sigma(t)$ - неизвестные функции. При подстановке в уравнение получим:

$$i\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2}\omega^2 x_1^2 \phi + (\ddot{\eta} + \omega^2\eta - f)x_1\phi + (\dot{\sigma} - \frac{1}{2}\dot{\eta}^2 + \frac{1}{2}\omega^2\eta^2 - f\eta)\phi. \tag{21}$$

Отсюда $\phi(x)$ удовлетворяет уравнению (19) с $f = 0$ при выполнении условий:

$$\begin{cases} \ddot{\eta} + \omega^2\eta = f(t), \quad \eta(-\infty) = \dot{\eta}(-\infty) = 0, \\ \sigma(t) = \int\limits_{-\infty}^{t} \mathcal{L}(t')dt'. \end{cases}$$

Здесь $\mathcal{L}$ - классический лагранжиан:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\dot{\eta}^2 - \frac{1}{2}\omega^2\eta^2 + f\eta.$$

Исходя из написанного выше, собственные функции записываются так [4]:

$$\Psi_n(x,t) = \Phi_n(x - \eta(t), \omega_0) e^{-i[(n+\frac{1}{2})\cdot\omega_0 t - \frac{1}{2}\int\limits_0^t f\eta dt']}, \tag{22}$$

где Φ_n - стационарные состояния гармонического осциллятора с постоянной частотой ω_0:

$$\Phi_n(x,\omega_0) = (\frac{1}{2^n \cdot n!} \cdot \sqrt{\frac{\omega_0}{\pi}})^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\cdot\omega_0 x^2} H_n(\sqrt{\omega_0}x), \tag{23}$$

где H_n - полиномы Эрмита: $H_n = (-1)^n e^{\omega_0 x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-\omega_0 x^2}$.

2.3 Численное решение уравнения Шрёдингера для нахождения квазиэнергии

Рассмотрим потенциал $V(x,t) = m \cdot l^2 \cdot \omega^2(t) \cdot (1 - \cos x)$. Здесь $\omega(t)^2 = \omega_0^2 + \epsilon \cdot \cos t$. Уравнение Шрёдингера с гамильтонианом $H = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$ запишется в виде:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + V(x,t)\Psi \tag{24}$$

Вспомним, что $\Psi(x,t) = e^{-i\varepsilon t} u(x,t)$. Подставив в уравнение Шрёдингера (24), получим:

$$\varepsilon u + i \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + V u. \tag{25}$$

Фунция $u(x,t)$ удовлетворяет следующим периодическим и граничным условиям:

$$u(x + 2\pi, t) = u(x,t), \quad u(x,t) = u(x, t+T).$$

Решение будем рассматривать на отрезке $[-\pi, \pi]$. Для нахождения спектра энергий, положим $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$. Получим аналог уравнения теплопроводности:

$$\varepsilon u = -\frac{1}{2m} u^{''} + V u \tag{26}$$

$$\varepsilon u(x,t) = -\frac{1}{2m} u^{''}(x,t) + m \cdot l^2 \cdot \omega^2(t) \cdot (1 - \cos x) u(x,t) \tag{27}$$

Здесь предполагаем, что $\omega^2(t) = \omega_0^2 + \epsilon \cdot \cos(\nu t)$. Можем положить три константы равными единице: $m = 1, \hbar = 1, \omega_0 = 1$.
Проэволюционируем стационарные состояния для гармонического осциллятора (это будут состояния в начальный момент времени):

$$\Phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}} \cdot \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right), \tag{28}$$

что при трёх константах, равных единице, даст:

$$\Phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}} \cdot \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \cdot H_n(x). \tag{29}$$

В результате получим:

$$\tilde{\Phi}_n = U(T, t_{N-1}) \ldots U(t_1, 0) \Phi_n. \tag{30}$$

С другой стороны, проэволюционированные состояния можно записать следующим образом:

$$\tilde{\Phi}_n = U(T, 0)\Phi_n = \sum_k a_{nk} \Phi_k. \tag{31}$$

Коэффициенты разложения ищутся следующим образом:

$$a_{nk} = \int_{-L}^{L} \tilde{\Phi}_n \Phi_k dx. = \sum_j \tilde{\Phi}_k(x_j)\Phi_k(x_j)h \tag{32}$$

Запись волновых функций:

$$\Psi(x,0) = c_n\Phi_n(x); \quad \Psi(x,T) = \sum_{n,k} c_n a_n k \Phi_k = e^{-i\varepsilon T}\Psi(x,0) \tag{33}$$

Коэффициенты разложения будут представлять собой диагональную матрицу с элементами λ_i на диагонали, где $|\lambda_i| \approx 1$:

$$a_{nk} \xrightarrow{diag} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_N \end{pmatrix}. \tag{34}$$

Из (33) видно, что аргументом комплексной величины λ_i можно назвать выражение:

$$arg(\lambda_i) = -\varepsilon_i T. \tag{35}$$

Итак, собственные значения a_{kn} назовём λ_i, а собственные функции (собственные вектора) - v_i. Таким образом, спектр энергий будет искаться в виде:

$$\varepsilon_i = -\frac{arg(\lambda_i)}{T}, \tag{36}$$

где $\lambda_i = \overbrace{|\lambda_i|}^{\approx 1} \cdot e^{-i\varepsilon_i T}$. Собственные функции же будут выражаться комбинацией собственных векторов и стационарных состояний гармонического осциллятора:

$$\Psi_i(x,0) = \sum_n v_i^n \Phi_n. \tag{37}$$

2.4 Реализация вычислений

Для решения полученного уравнения, воспользуемся разностной схемой Кранка-Николсона, аппроксимация оператора эволюции [5] запишется следующим образом:

$$U(t_{k+1}, t_k) = (I + i\frac{\tau}{2}H(t_k + \frac{\tau}{2}))^{-1} \cdot (I - i\frac{\tau}{2}H(t_k + \frac{\tau}{2})). \quad (38)$$

Докажем утверждение выше следующим образом. Операторы координаты и импульса и гамильтониана в безразмерном случае могут быть записаны так:

$$x = x, \quad p = -i\frac{\partial}{\partial x},$$

$$H = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \quad (39)$$

При задании симметричной координатной сетки в пределах $(-L, L)$ в виде:

$$x_k = -L + kh, \quad k \in (0, N), \quad (40)$$

где N - число интервалов сетки. Приближённые равенства для производных со вторым порядком точности запишутся следующим образом [5]:

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x} = \frac{1}{2h}(f(x-h) + f(x+h)) + O(h^2), \quad (41)$$

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2}(f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)) + O(h^2). \quad (42)$$

Тогда можем записать матрицы операторов координаты и импульса, воспользовавшись (40):

$$x_{ik} = x_k\delta_{ik}, \quad p_{ik} = -\frac{i}{2h}(\delta_{i,k+1} - \delta_{i,k-1}), \quad (43)$$

где δ_{ik} - символ Кронеккера. Тогда гамильтониан можно записать в виде:

$$H_{ik} = -\frac{1}{2h^2}(\delta_{i,k+1} + \delta_{i,k-1}) + (V(x_k) + \frac{1}{h^2})\delta_{ik}. \quad (44)$$

При этом для аппроксимации оператора эволюции выглядит следующим образом [5]:

$$U(t_{k+1}, t_k) = (I + i\frac{\tau}{2}H(t_k + \frac{\tau}{2}))^{-1} \cdot (I - i\frac{\tau}{2}H(t_k + \frac{\tau}{2})) + O(\tau^3), \quad (45)$$

что и совпадает с выражением (38).

Для начала нужно проверить, работает ли программа, на примере потенциала $\frac{x^2}{2}$. В этом случае мы знаем, что модуль волновой функции не меняется при эволюции: Меняется же в этом случае только аргумент.

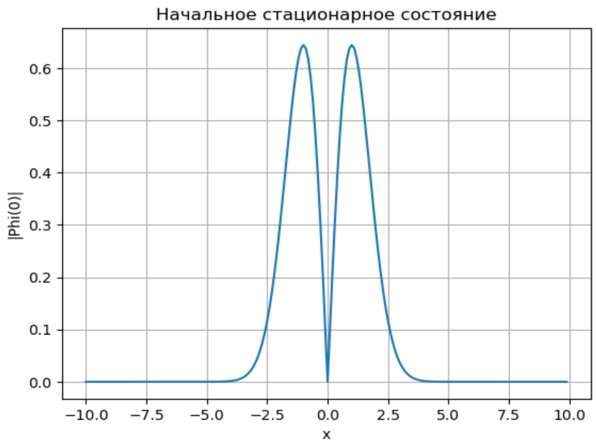

Рис. 1: Потенциал $\frac{x^2}{2}$ в начальный момент времени, $n = 20$

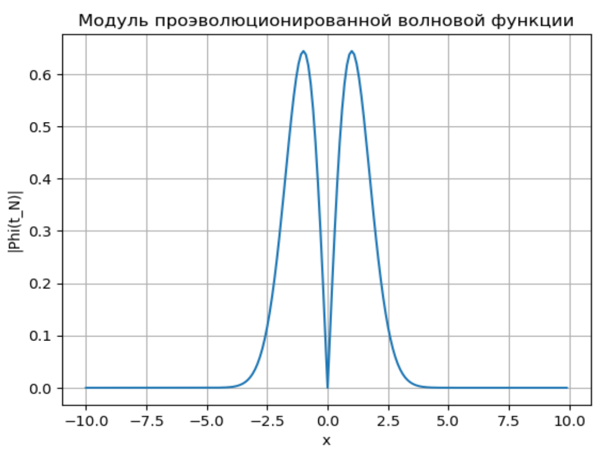

Рис. 2: Потенциал $\frac{x^2}{2}$ в проэволюционированном случае, $n = 20$

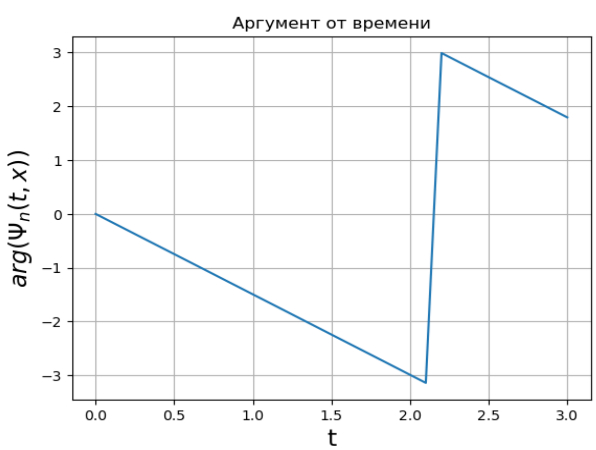

Рис. 3: Зависимость аргумента от времени для $\frac{x^2}{2}$, $n = 20$

Для случая нашего потенциала $V(x,t) = m \cdot l^2 \cdot \omega^2(t) \cdot (1 - \cos x)$ получаем следующие графики:

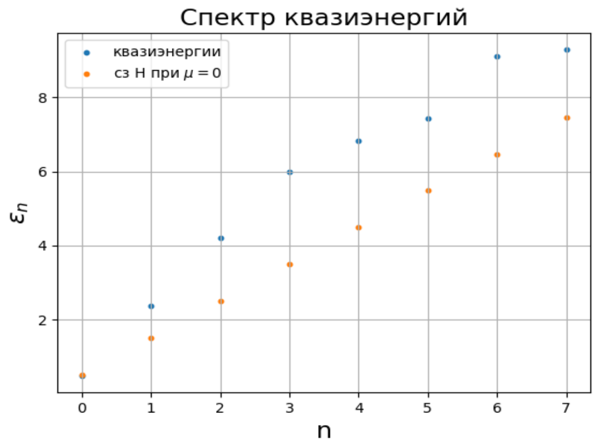

Рис. 4: Спектр энергий для $\frac{x^2}{2}$

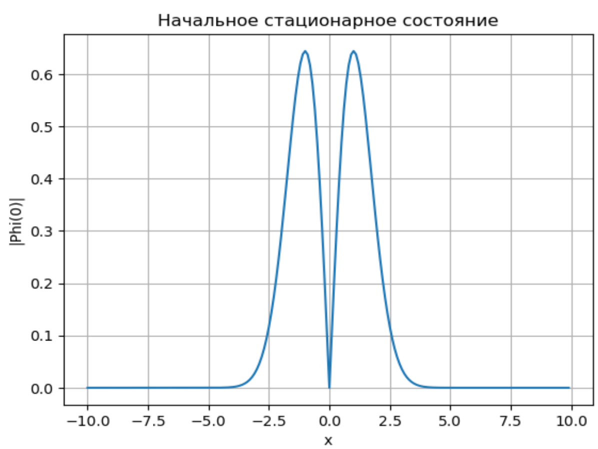

Рис. 5: Потенциал $V(x,t) = m \cdot l^2 \cdot \omega^2(t) \cdot (1 - \cos x)$ в начальный момент времени

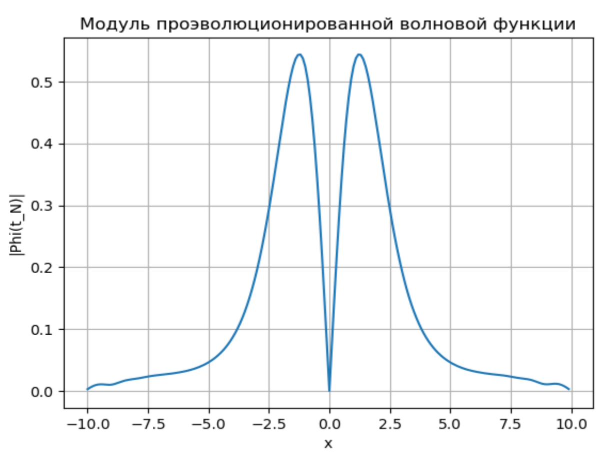

Рис. 6: Потенциал $V(x,t) = m \cdot l^2 \cdot \omega^2(t) \cdot (1 - \cos x)$ в проэволюционированном случае

Были также получены собственные функции для пяти различных начальных собственных состояний гармонического осциллятора:

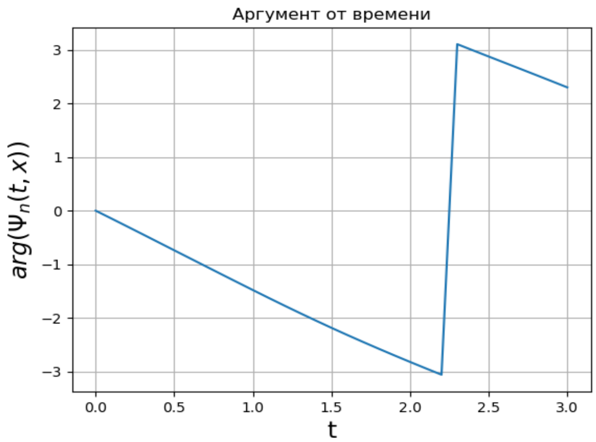

Рис. 7: Зависимость аргумента от времени для $V(x,t) = m \cdot l^2 \cdot \omega^2(t) \cdot (1 - \cos x)$

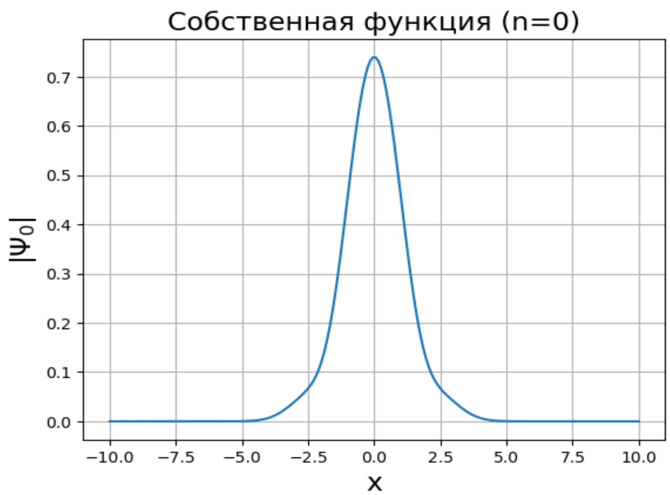

Рис. 8: Собственная функция при $n = 0$

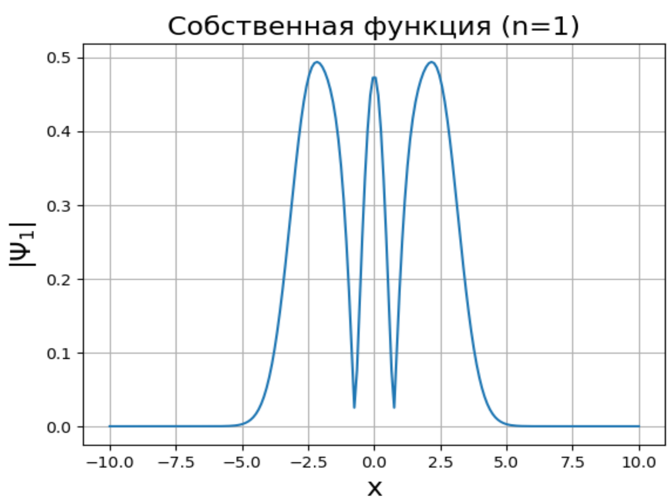

Рис. 9: Собственная функция при $n = 1$

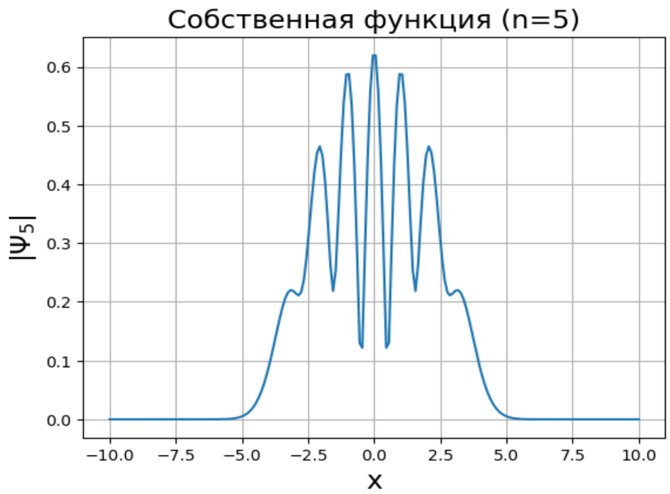

Рис. 10: Собственная функция при $n = 5$

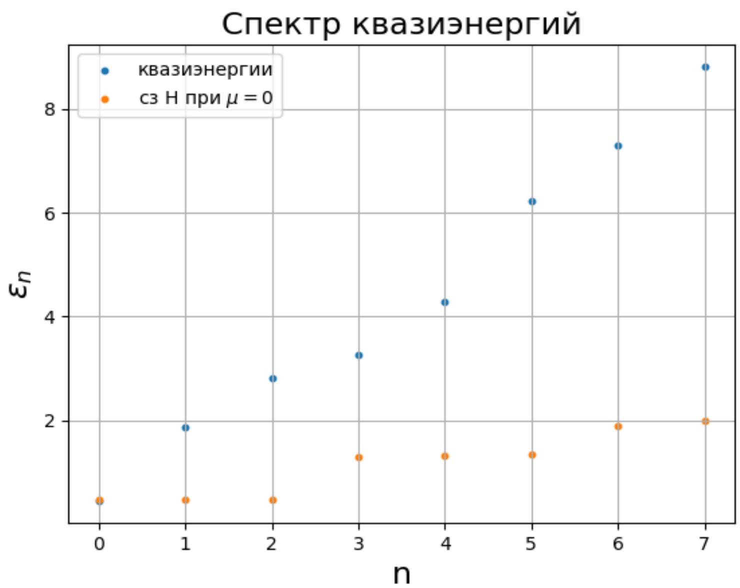

Рис. 11: Спектр квазиэнергий для $V(x,t) = m \cdot l^2 \cdot \omega^2(t) \cdot (1 - \cos x)$

2.5 Квазимомент импульса

Вернёмся снова к пространственным симметриям. Как мы помним, изотропность пространства приводит к закону сохранения момента импульса. Найдём аналогичную величину для дискретных симметрий. Назовём оператором поворота $R(\chi)$ величину, связанную с углом поворота в пространстве соотношением:

$$R(\chi) \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{L}\chi\mathbf{n}} \tag{46}$$

Оператор поворота $R(\chi)$ действует в пространстве волновых функций (так же, как и оператор $\mathbf{L}$ - оператор углового момента, векторный эрмитов оператор, который в квантовой механике имеет смысл полного момента квантовой частицы).

Он связан с оператором поворота r, действующим в пространстве V_3 следующим образом:

$$R(\chi) \cdot \Psi(x, y, z) = \Psi(x \cos(\chi) + y \sin(\chi), y \cos(\chi) - x \sin(\chi), z)), \tag{47}$$

$$R(\chi)\Psi(\vec{x}) = \Psi(r^{-1}\vec{x}). \tag{48}$$

Вектором поворота вокруг оси $\mathbf{n}$ назовём $\chi := \chi \cdot \mathbf{n}$.
Здесь предполагаем, что поворот происходит из l-системы координат в s-систему. Связь между векторами состояний в декартовых системах координат можно записать следующим образом:

$$|\Psi, s\rangle = R(\chi)\, |\Psi, l\rangle \tag{49}$$

Формально это соотношение можно вывести при помощи уравнения Шрёдингера:
Так как $R(\chi)$ отображает пространство векторов $|\Psi, l\rangle$ в $|\Psi, s\rangle$, то из сохранения

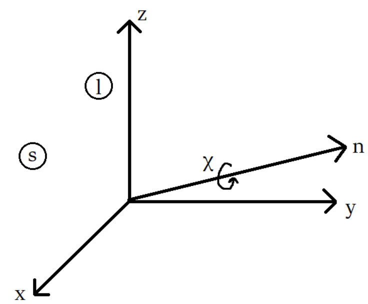

Рис. 12: Оператор поворота в декартовой СК

во времени нормировки состояний:

$$\langle \Psi, s|\Psi, s\rangle = \langle \Psi, l|R^{\dagger}(\chi)R(\chi)|\Psi, l\rangle = \langle \Psi, l|\Psi, l\rangle \tag{50}$$

будет видно, что оператор поворота будет унитарным, так как $R^{\dagger}(\chi)R(\chi) = 1$. Подставим теперь такое определение в уравнение Шрёдингера:

$$\{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}R(\chi) - HR(\chi)\}\, |\Psi, l\rangle = 0, \tag{51}$$

откуда и получаем искомое соотношение (46), похожее на оператор эволюции для трансляции времени.
Решением уравнения Шрёдингера будут обе функции: и в l-системе координат, и в s-системе координат (это следует из изотропности пространства). Тогда можем получить цепочку равенств. С одной стороны:

$$H\, |\Psi, s\rangle = i\hbar\frac{\partial\, |\Psi, s\rangle}{\partial t} = HR(\chi)\, |\Psi, l\rangle \tag{52}$$

С другой стороны:

$$i\hbar\frac{\partial\left|\Psi,s\right\rangle}{\partial t}=i\hbar R(\chi)\frac{\partial\left|\Psi,l\right\rangle}{\partial t}=R(\chi)H\left|\Psi,l\right\rangle \tag{53}$$

По определению операторной экспоненты (так как вводили оператор поворота как (46)):

$$R(\chi)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{k!}(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{L}\chi)^k, \tag{54}$$

Из предыдущей строчки видно, что гамильтониан будет коммутировать с оператором поворота:

$$[H,R(\chi)]=0, \tag{55}$$

Отсюда следует коммутативность:

$$[H,\mathbf{L}]=0.$$

Для удобства и краткости будем называть $R(\chi)\equiv R_\Phi$, а также можно будет ввести оператор $\mathbf{l}=\frac{\mathbf{L}}{\hbar}$, где $\hbar=1$, то есть $\mathbf{l}=\mathbf{L}$. В квантовой механике традиционно измеримы квадрат углового момента и одна из его компонент (традиционно z) - будет показано ниже.
Аргумент любой функции $f(\chi)$ смещается на Φ. Запишем это следующим образом:

$$R_\Phi f(\chi)=f(\chi+\Phi). \tag{56}$$

В силу периодичности нашего гамильтониана, запишем, учитывая, что Φ - период, причём у нас есть симметрия именно относительно поворота $\Phi=\frac{2\pi}{n}$:

$$R_\Phi H\left|\Psi,l\right\rangle:=R_\Phi H\Psi=H(\chi+\Phi)\Psi(\chi+\Phi)=H(\chi)\Psi(\chi+\Phi)=HR_\Phi\Psi. \tag{57}$$

Уравнение (57) выполняется тождественно для любой функции Ψ, поэтому

$$R_\Phi H=HR_\Phi. \tag{58}$$

В сущности, выражение (57) показывает, что эти операторы коммутируют между собой. Также, применяя последовательно оператор поворота два раза, знаем, что применение оператора поворота два раза можно менять местами (изотропность пространства относительно поворота):

$$R_\Phi R_\Upsilon\Psi(\chi)=R_\Upsilon R_\Phi\Psi(\chi)=\Psi(\chi+\Phi+\Upsilon).$$

Обозначим композицию операторов поворота в виде:

$$R_\Phi R_\Upsilon\Psi=R_\Upsilon R_\Phi\Psi=R_{\Phi+\Upsilon}\Psi. \tag{59}$$

Из соотношений (58) и (59) видно, что гамильтониан H и операторы R_Φ для всех Φ образуют набор коммутирующих операторов. Тогда собственные состояния H выберем таким образом, чтобы они являлись также и собственными состояниями всех R_Φ. Запишем:

$$H\Psi = \mathcal{E}\Psi, \tag{60}$$

$$R_\Phi\Psi = \zeta(\Phi)\Psi. \tag{61}$$

Здесь собственными значениями оператора поворота $\zeta(\Phi)$ назвали величины, удовлетворяющие соотношению:

$$R_\Phi R_\Upsilon \Psi = R_\Upsilon R_\Phi \Psi = \zeta(\Phi) R_\Upsilon \Psi = \zeta(\Phi)\zeta(\Upsilon)\Psi. \tag{62}$$

С другой стороны, мы можем записать условие на периоды этих собственных значений:

$$R_\Upsilon R_\Phi \Psi = R_{\Phi+\Upsilon}\Psi = \zeta(\Phi+\Upsilon)\Psi, \tag{63}$$

Тогда для собственных значений должно выполняться:

$$\zeta(\Phi+\Upsilon) = \zeta(\Phi)\zeta(\Upsilon).$$

Выразим период оператора в виде периодической функции собственного значения:

$$\zeta(\mathbf{e}_i) = e^{i\cdot 2\pi\chi_i},$$

выбрав соответствующим образом χ_i. Тогда, если $\Phi = \mathbf{e}_1 \cdot n_1 + \mathbf{e}_2 \cdot n_2 + \mathbf{e}_3 \cdot n_3$, то:

$$\zeta(\Phi) = \zeta(\mathbf{e}_1)^{n_1} \cdot \zeta(\mathbf{e}_2)^{n_2} \cdot \zeta(\mathbf{e}_3)^{n_3}. \tag{64}$$

Последнее равенство эквивалентно:

$$\zeta(\Phi) = e^{i\mathbf{L\Phi}}. \tag{65}$$

Таким образом, получаем, что для поворота на угол Φ справедливо разложение собственного значения $\zeta(\Phi)$ по базису $\zeta(\mathbf{e_i})$. Выполняется цепочка равенств:

$$R_\Phi\Psi(\chi) = \Psi(\chi+\Phi) = \zeta(\Phi)\Psi(\chi) = e^{i\mathbf{L\Phi}}\Psi(\chi), \tag{66}$$

то есть разложение по Блоховским функциям в форме (12). Тогда будет справедливо сохранение квазимомента импульса во внешнем периодическом поле при возникновении симметрии на угол $\Phi = \frac{2\pi}{n}$. Подчеркнем, что истинного сохраняющегося момента импульса в этом случае вообще говоря нет, так как во внешнем поле закон сохранения момента импульса не будет имеет места в общем случае. Закон сохранения момента импульса записывается следующим образом: сумма моментов импульса всех тех системы остаётся постоянной, если воздействующие на данную систему моменты внешних сил будут скомпенсированы. Кроме того, если

в цилиндрических координатах сохраняется обобщённый импульс по ϕ, то будет сохраняться проекция момента импульса. А узнать, сохраняется ли весь момент импульса, можно по виду потенциальной энергии: если она зависит только от r, то сохраняется. Замечательно, однако, что в периодическом поле частицу тем не менее можно характеризовать некоторым постоянным вектором.
Перейдём к нахождению собственных значений и собственных функций оператора квазиимпульса. Рассмотрим сначала классический момент импульса. Оператор момента импульса можно ввести следующим образом:

$$\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}] = -i\hbar[\mathbf{r} \times \nabla]. \tag{67}$$

Нетрудно заметить, что если $\mathbf{L} = L_x\mathbf{e_x} + L_y\mathbf{e_y} + L_z\mathbf{e_z}$, то коммутаторы будут иметь вид:

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, [L_y, L_z] = i\hbar L_x, [L_z, L_x] = i\hbar L_y \tag{68}$$

Найдём собственные значения оператора проекции момента импульса [9]:

$$L_z\Psi = l_z\Psi, \quad -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial\chi} = l_z\Psi$$

$$\Psi_m = Ce^{\frac{i}{\hbar}l_z\chi}$$

Уже писал выше, что можно определить СЗ и СФ для оператора проекции момента импульса на ось z. Так как функция периодическая, то $\Psi_m(\chi) = \Psi_m(\chi + 2\pi)$. Отсюда последует, что:

$$L_z = m\hbar, m = \pm1, \pm2, \pm3, ... \tag{69}$$

Из условия нормировки собственные функции:

$$\Psi_m(\chi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\chi}. \tag{70}$$

Воспользуемся комплексными комбинациями [9]: $L_+ = L_x + iL_y, \quad L_- = L_x - iL_y$.

$$L^2 = L_+L_- + L_z^2 + L_z$$

Собственную функцию оператора момента импульса назовём Φ_m. Тогда из коммутационных соотношений (68) видно:

$$L_zL_\pm\Phi_m = (m\hbar \pm 1)L_\pm\Phi_m \tag{71}$$

$$\Phi_{m+1} = const \cdot L_+\Phi_m, \quad \Phi_{m-1} = const \cdot L_-\Phi_m \tag{72}$$

Отсюда видно, что собственные значения оператора момента импульса имеют вид $L^2 = \hbar^2 \cdot \mathbf{l}(\mathbf{l}+1)$. Здесь $\mathbf{l}$ - это максимальная проекция момента импульса на

ось z в единицах $\hbar$.
Коммутаторы проекций момента импульса отличны от нуля, то есть любые 2 проекции момента импульса не могут быть одновременно измеримы. Отсюда следует важный вывод: две любые проекции момента импульса не могут одновременно иметь определенные значения. Следовательно, и сам вектор момента импульса не имеет определенного направления в пространстве. Определенное значение имеют одновременно абсолютная величина момента импульса (квадрат момента импульса сохраняется) и одна из его проекций.
Вернёмся к тому, что гамильтониан коммутирует с оператором поворота (55). Тогда во внешнем поле собственные функции операторов H и L должны совпадать, а между собственными значениями должна быть функциональная связь:

$$E = E(L_q).$$

Найдём общий вид оператора квазимомента импульса L_q:

$$\frac{dL_q}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[L_q H - H L_q] \tag{73}$$

Между L и L_q также должна существовать определённая связь: в предельном случае отсутствия внешнего поля квазимомент импульса должен переходить в момент импульса. Будем рассматривать только проекцию на ось z. Из этого условия видно для проекции, что:

$$L_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \tag{74}$$

В полярных координатах (было показано выше):

$$x = r\sin\theta\cos\chi, \quad y = r\sin\theta\sin\chi, \quad z = r\cos\theta$$

$$L_{z,q} = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) + i\hbar\Theta(\chi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\chi} + i\hbar\Theta(\chi) \tag{75}$$

Наличие добавки Θ обеспечит коммутацию $L_{z,q}$ и H. Запишем волновую функцию через Блоховские функции и назовём её $\Psi_q(\chi)$. Здесь функция $u(\chi)$ - периодическая:

$$\Psi(\chi) = R_\Phi u = u(\chi + \Phi) = \zeta(\Phi)u = e^{im\chi}u(\chi)$$

Уравнение на поиск собственных значений:

$$L_{z,q}\Psi(\chi) = m\Psi(\chi)$$

$$L_{z,q}\Psi(\chi) = (-i\hbar\frac{\partial}{\partial\chi} + i\hbar\Theta(\chi)) \cdot (e^{im\chi}u(\chi))$$

$$L_{z,q}\Psi(\chi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\chi} \cdot (e^{im\chi}u(\chi)) + i\hbar\Theta(\chi)e^{im\chi}u(\chi) =$$

$$= -i \cdot im\hbar\Psi(\chi) - i\hbar e^{im\chi}\frac{\partial}{\partial\chi}u(\chi) + i\hbar\Theta(\chi)\Psi(\chi) =$$

$$= m\hbar\Psi(\chi) + i\hbar(\Theta(\chi) - \frac{\partial}{\partial\chi}(\ln u(\chi))\Psi(\chi) = m\Psi(\chi) \tag{76}$$

Проделав эти операции, приходим к аналогичному результату для собственных значений обычного момента импульса:

$$L_{z,q} = m\hbar. \tag{77}$$

Кроме того, получили выражение для добавки $\Theta(\chi)$:

$$\Theta(\chi) = \frac{\partial}{\partial\chi}\ln u(\chi). \tag{78}$$

То есть для систем с дискретными симметриями существует проекция квазимомента импульса, собственные значения которого выражаются формулой (77). Если в теореме Блоха [7] для электрона в кристаллической решётке условие на квазиволновой вектор ставилось в виде:

$$(\mathbf{k}, \mathbf{a}_j) = \frac{2\pi}{N_j} \cdot p_j, \tag{79}$$

где $p_j \in \mathbb{Z}$, а $\mathbf{a}_j$ - вектор трансляции решётки, то в данном случае из условия периодичности следует, что m принимает набор целых значений $\mathbb{Z}$ (как и в случае обычного момента импульса).
Оператор проекции квазимомента импульса в таком случае будет иметь вид:

$$L_{z,q} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\chi} + i\hbar\Theta(\chi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\chi} + i\hbar(\frac{\partial}{\partial\chi}\ln u(\chi)). \tag{80}$$

Несмотря на нелинейную добавку, оператор L_z, q будет линейным. Мы его задаём действием на конкретные базисные функции, то есть действуем именно в этом базисе. Приведём пример: назовём A некторый оператор, который действует следующим образом:

$$Av_1 = A\begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ln x^1 \\ \ln x^2 \end{pmatrix} \tag{81}$$

Аналогично:

$$Av_2 = A\begin{pmatrix} y^1 \\ y^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ln y^1 \\ \ln y^2 \end{pmatrix} \tag{82}$$

Тогда:

$$A(\alpha v_1 + \beta v_2) = \alpha\begin{pmatrix} \ln x^1 \\ \ln x^2 \end{pmatrix} + \beta\begin{pmatrix} \ln y^1 \\ \ln y^2 \end{pmatrix}. \tag{83}$$

В нашем случае запишется так:

$$L_{z,q}\Psi(\chi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\chi}\Psi(\chi) + i\hbar\Theta(\chi)\Psi(\chi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\chi}\Psi(\chi) + i\hbar(\frac{\partial}{\partial\chi}\ln u(\chi))\Psi(\chi). \quad (84)$$

То есть условие линейности запишется следующим образом:

$$L_{z,q}(\alpha\Psi_1+\beta\Psi_2) = \alpha\cdot(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\chi}\Psi_1+i\hbar(\frac{\partial}{\partial\chi}\ln u_1)\Psi_1)+\beta\cdot(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\chi}\Psi_2+i\hbar(\frac{\partial}{\partial\chi}\ln u_2)\Psi_2) \quad (85)$$

3 Итоги работы

В процессе выполнения работы были изучены понятия квазиимпульса, квазиэнергии и квазимомента импульса. Были приведены законы сохранения классических трёх величин: импульса, энергии и момента импульса как следствие теоремы Нётер. Кроме того, была рассмотрена теорема Блоха для периодической структуры. В случае квантовой системы с дискретной симметрии по времени (трансляции на период T) были найдены собственные фунции гамильтониана для данного случая осциллятора с потенциалом $V(x,t) = m \cdot l^2 \cdot \omega^2(t) \cdot (1 - \cos x)$, где $\omega(t)^2 = \omega_0^2 + \epsilon \cdot \cos t$, а также спектр квазиэнергий.
Помимо этого, была рассмотрена задача о введении квазимомента импульса. Были определены собственные значения оператор проекции момента импульса.

Список литературы

[1] E. Noether, Gott. Nachr. 1918 (1918), 235-257 [arXiv:physics/0503066 [physics]].

[2] A. Deriglazov, Sect. 8.8.2 in „Classical Mechanics: Hamiltonian and Lagrangian Formalism“, (doi:10.1007/978-3-319-44147- 4).

[3] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Теоретическая физика, том 9, „Статистическая физика, часть 2“, Физматлит, 2021 г.

[4] А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, „Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике“, Наука, 1971 г.

[5] С. И. Винницикий, И. В. Пузынин, А. В. Селин, „Численное решение нестационарного уравнения Шрёдингера с повышенной точностью“, ОИЯИ, Дубна, 1998 г.

[6] Г. Л. Коткин, В. Г. Сербо, „Сборник задач по классической механике„, Регулярная и хаотическая динамика, 2010 г.

[7] Н. Ашкрофт, Н. Мермин, „Физика твёрдого тела“, Мир, 1979 г.

[8] В. В. Добронравов, „Основы аналитической механики“, Высшая школа, 1976 г.

[9] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Теоретическая физика, том 3, „Квантовая механика. Нерелятивистская теория“, Физматлит, 2021 г.