Дискретная теорема Нётер

Курсовая работа студента 214 группы
Чиркова Владислава Игоревича
Научный руководитель:
Доктор физ.-мат. наук, профессор
Белокуров Владимир Викторович

19.05.2023

Постановка задачи

Необходимо рассмотреть понятия квазиимпульса, квазимомента импульса и квазиэнергии;
Необходимо сравнить полученные результаты с классическими величинами;
Доказать существование квазимомента импульса для дискретных симметрий, найти СЗ и СФ оператора проекции квазимомента импульса;
Найти собственные функции в случае потенциала $V(x,t) = m \cdot l^2 \cdot \omega^2(t) \cdot (1 - \cos x)$, где $\omega(t)^2 = \omega_0^2 + \epsilon \cdot \sin t$;
Найти спектр энергий в этом же случае.

Квазиимпульс. Теорема Блоха

Собственные состояния ψ одночастичного гамильтониана $H = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + U(\mathbf{r})$ 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 периодом $\mathbf{R}$:

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

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

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

Квазимомент импульса

Введём оператор поворота: $R(\chi) \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{L}\chi\mathbf{n}}$
$|\Psi, s\rangle = R(\chi)\,|\Psi, l\rangle$

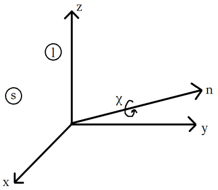

Рис.: Оператор поворота в декартовой СК

Доказано, что $[H, R(\chi)] = 0$, то есть $[H, L] = 0$.

Квазимомент импульса

Гамильтониан периодичен, а также имеем симметрию на угол $\Phi = \frac{2\pi}{n}$
$R_\Phi H \left|\Psi, l\right\rangle := R_\Phi H\Psi = H(\chi + \Phi)\Psi(\chi + \Phi) = H(\chi)\Psi(\chi + \Phi) = HR_\Phi\Psi$, то есть имеет место: $R_\Phi H = HR_\Phi$.

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

$H\Psi = \mathcal{E}\Psi$,
$R_\Phi\Psi = \zeta(\Phi)\Psi$.
Для СЗ верно: $\zeta(\Phi + \Upsilon) = \zeta(\Phi)\zeta(\Upsilon)$.
Отсюда следует, что $\zeta(\Phi) = e^{i\mathbf{L}\Phi}$.
Выполняется цепочка равенств:
$R_\Phi\Psi(\chi) = \Psi(\chi + \Phi) = \zeta(\Phi)\Psi(\chi) = e^{i\mathbf{L}\Phi}\Psi(\chi)$,
то есть верна теорема Блоха.

Квазимомент импульса

Найдём общий вид оператора квазимомента импульса L_q:
$\frac{dL_q}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[L_q H - HL_q]$
Выражение для проекции на ось z в классическом случае:
$L_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})$
В сферических координатах для проекции квазимомента:
$L_{z,q} = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) + i\hbar\Theta(\chi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \chi} + i\hbar\Theta(\chi)$
Выражение через Блоховские функции:
$\Psi(\chi) = R_\Phi u = u(\chi + \Phi) = \zeta(\Phi)u = e^{im\chi}u(\chi)$
Уравнение на поиск собственных значений:

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

Квазимомент импульса

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

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

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

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

Проделав операции, получили собственные значения оператора проекции квазимомента импульса:
$L_{z,q} = m\hbar.$
Оператор проекции квазимомента импульса имеет вид:
$L_{z,q} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\chi} + i\hbar\Theta(\chi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\chi} + i\hbar(\frac{\partial}{\partial\chi}\ln u(\chi)).$

Квазиэнергия системы, подвергающейся периодическому воздействию

Уравнение Шрёдингера: $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi$, выберем решения:
$\Psi_\alpha(t+T) = \Psi_\alpha(t)\cdot e^{-i\alpha}$
Естественно назвать квазиэнергией величину :
$\varepsilon = \frac{\hbar\alpha}{T}, \quad T = \frac{2\pi}{\omega}.$
Квазиэнергия будет возникать в том случае, когда имеет место трансляция по времени на период T.

Численное решение уравнения Шрёдингера

Рассматриваем потенциал $V(x,t) = m \cdot l^2 \cdot \omega^2(t) \cdot (1 - \cos x)$,
где $\omega(t)^2 = \omega_0^2 + \epsilon \cdot \sin t$.
$\Psi(x,t) = e^{-i\varepsilon t} u(x,t)$
u(x $+2\pi, t) = u(x,t), \quad u(x,t) = u(x, t+T)$.
Получим следующее уравнение:
$\varepsilon u(x,t) + i\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = -\frac{1}{2m} u''(x,t) + m \cdot l^2 \cdot \omega^2(t) \cdot (1 - \cos x) u(x,t)$,
Здесь можем положить $m = 1, \hbar = 1, \omega_0 = 1$.
Состояния в начальный момент времени ищем в виде разложения по собственным функциям гармонического осциллятора:
$\Phi_n(x,0) = \sum_k v_n^k \Phi_k(x)$

Реализация вычислений

Координатная сетка:

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

$x = x, \quad p = -i\frac{\partial}{\partial x}$, операторы запишем в виде матриц:

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

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

Реализация вычислений

Приближённое значение оператора эволюции:

$U(t_{k+1}, t_k) = \exp\left(-i\tau H(t_k + \tau/2)\right) + O(\tau^3)$

Аппроксимацию можно записать так:

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

Эволюционированные состояния:

$\tilde{\Phi}_n = U(T, t_{N-1}) \dots U(t_1, 0)\Phi_n =$ U(T, 0) $\Phi_n = \sum\limits_k a_{nk}\Phi_k$

Коэффициенты разложения:

$a_{nk} = \int\limits_{-L}^{L} \tilde{\Phi}_n \Phi_k dx. = \sum\limits_j \tilde{\Phi}_k(x_j)\Phi_k(x_j)h$

Алгоритм вычислений

Записываем a_{nk} в диагональном виде:

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

где $|\lambda_i| \approx 1$.

$\Psi(x, T) = e^{-i\varepsilon T}\Psi(x, 0)$, то есть $arg(\lambda_i) = -\varepsilon_i T$.

Собственные функции: $\Psi_i(x, 0) = \sum\limits_n v_i^n \Phi_n$.

Проверка для гармонического осциллятора

$$V(t, x) = \frac{x^2}{2}$$

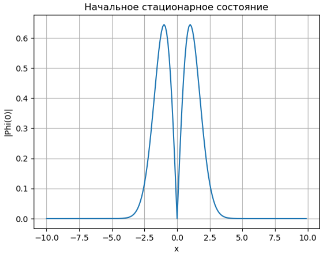

Рис.: В начальный момент времени

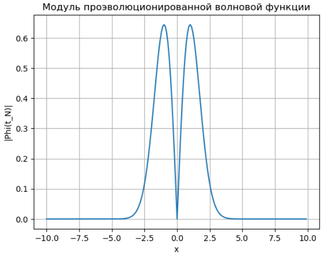

Рис.: После эволюции

Модельная задача

$$V(x,t) = l^2 \cdot \omega^2(t) \cdot (1 - \cos x),\ \omega(t)^2 = \omega_0^2 + \epsilon \cdot \sin t$$

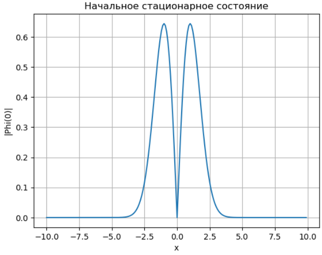

Рис.: В начальный момент времени

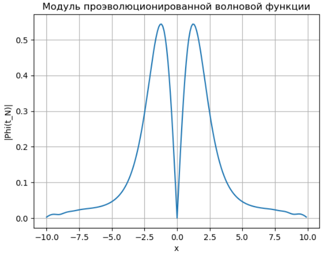

Рис.: После эволюции

Модельная задача

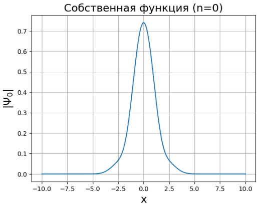

Рис.: СФ для $n = 0$

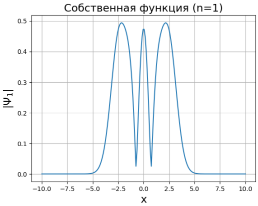

Рис.: СФ для $n = 1$

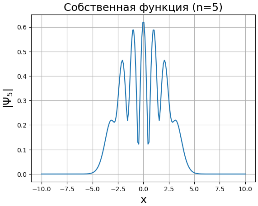

Рис.: СФ для $n = 5$

Модельная задача

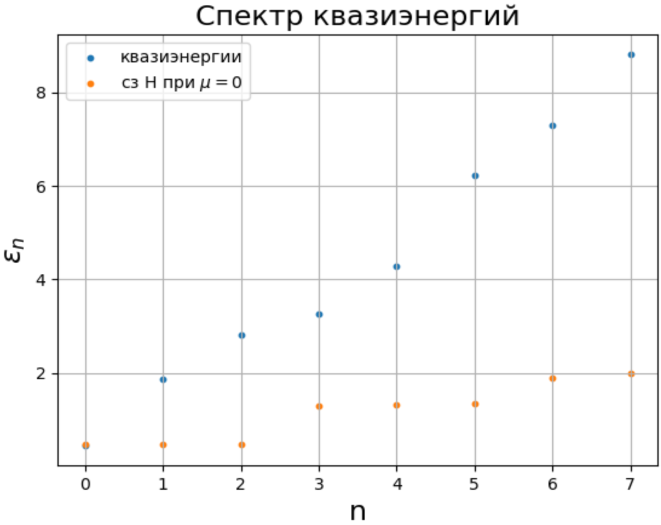

Рис.: Спектр квазиэнергий для $V(x,t) = m \cdot l^2 \cdot \omega^2(t) \cdot (1 - \cos x)$

Выводы

Изучены понятия квазиимпульса, квазиэнергии и квазимомента импульса;

Рассмотрена теорема Блоха для периодической структуры;

Найдены собственные функции и спектр энергий для случая потенциала $V(x,t) = m \cdot l^2 \cdot \omega^2(t) \cdot (1 - \cos x)$;

Получено выражение для оператора проекции квазимомента импульса и его собственные значения.