КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Лекция №6: Системы с несколькими степенями свободы и некоторые симметрии в квантовой механике

А.Г. Семенов

I. СИСТЕМЫ С НЕСКОЛЬКИМИ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ И РАЗДЕЛЕНИЕ ПЕРЕМЕННЫХ

На предыдущих лекциях основное наше внимание было сосредоточено на простых системах, имеющих одну степень свободы, как например частица во внешнем потенциале. Давайте рассмотрим немного более сложные системы. В качестве первого примера рассмотрим систему, состоящую из двух невзаимодействующих частиц, массами m_1 и m_2, которые помещены во внешний потенциал $V(x)$. Тот факт, что система состоит из двух подсистем означает, что Гильбертово системы в целом представляет собой тензорное произведение Гильбертовых пространств подсистем $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Таким образом если в $\mathcal{H}_1$ выбран базис $|n\rangle_1$, а в $\mathcal{H}_2$ - базис $|n\rangle_2$, то $|n,m\rangle = |n\rangle_1 \otimes |n\rangle_2$ будет базисом в $\mathcal{H}$. Гамильтониан системы в целом при этом будет представлять собой сумму Гамильтонианов подсистем

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(\hat{x}_1) + V(\hat{x}_2) \tag{1}$$

Мы ввели две пары канонически сопряженных операторов координат частиц и их импульсов. При этом коммутационные соотношения канонические $[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = -i\delta_{ij}$. Для нахождения энергетического спектра системы в данном случае достаточно найти все собственные состояния $\hat{H}_1|n\rangle_1 = E_{1,n}|n\rangle_1$, $\hat{H}_2|n\rangle_2 = E_{2,n}|n\rangle_2$. После этого все собственные состояния Гамильтоанина всей системы имеют вид $|n,m\rangle = |n\rangle_1 \otimes |n\rangle_2$. При этом

$$\hat{H}|n,m\rangle = (E_{1,n} + E_{2,n})|n,m\rangle \tag{2}$$

или, иными словами, энергии двух невзаимодействующих подсистем складываются. Добавим взаимодействие. Это означает, что к Гамильтониану добавляется член, зависящий от координат обеих частиц

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + V(\hat{x}_1) + V(\hat{x}_2) + V_i(\hat{x}_1, \hat{x}_2) \tag{3}$$

В общем случае исследование данной системы гораздо сложнее. В частности, в координатном представлении для нахождения собственных состояний в этом случае необходимо решить уравнение в частных производных

$$-\frac{\partial^2_{x_1}\psi(x_1,x_2)}{2m_1}-\frac{\partial^2_{x_2}\psi(x_1,x_2)}{2m_2}+\left(V(x_1)+V(x_2)+V_i(x_1,x_2)\right)\psi(x_1,x_2)=E\psi(x_1,x_2) \quad (4)$$

Существует, однако, ряд случаев, когда возможно существенное упрощение, или, иными словами, в которых модно произвести разделение переменных. Рассмотрим некоторые примеры, после чего постараемся выяснить природу такого разделения переменных.

II. ДВЕ ЧАСТИЦЫ, ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МЕЖДУ КОТОРЫМИ ЗАВИСИТ ОТ ВЗАИМНОГО РАССТОЯНИЯ

В качестве первого примера рассмотрим систему, состоящую из двух частиц с массами m_1 и m_2, которые взаимодействуют при помощи потенциала, который зависит только от расстояния между частицами. Гамильтониан при этом имеет вид

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}_1^2}{2m_1}+\frac{\hat{p}_2^2}{2m_2}+V(\hat{x}_1-\hat{x}_2). \quad (5)$$

Соответствующее уравнение Шредингера в координатном представлении записывается как

$$-\frac{\partial^2_{x_1}\psi(x_1,x_2)}{2m_1}-\frac{\partial^2_{x_2}\psi(x_1,x_2)}{2m_2}+V_i(x_1,-x_2)\psi(x_1,x_2)=E\psi(x_1,x_2). \quad (6)$$

Сделаем замену координат в данном уравнении и введем новые переменные

$$X=\frac{m_1x_1+m_2x_2}{m_1+m_2},\quad x=x_1-x_2,\qquad x_1=X+\frac{m_2x}{m_1+m_2},\quad x_2=X-\frac{m_1x}{m_1+m_2}. \quad (7)$$

При этом производные преобразуются к виду

$$\frac{\partial}{\partial x_1}=\frac{m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{\partial}{\partial x},\qquad\qquad \frac{\partial}{\partial x_2}=\frac{m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial X}-\frac{\partial}{\partial x} \quad (8)$$

и в новых переменных уравнение будет иметь вид

$$-\frac{\partial^2_X\tilde{\psi}(X,x)}{2(m_1+m_2)}-\frac{(m_1+m_2)\partial^2_x\tilde{\psi}(X,x)}{2m_1m_2}+V(x)\psi(X,x)=E\psi(X,x) \quad (9)$$

Заметим, что уравнение выглядит в точности как уравнение Шредингера для двух невзаимодействующих систем, первая из которых является свободной частицей с массой m_1+m_2, а вторая является частицей с массой $\mu=\frac{m_1m_2}{m_2+m_2}$, движущейся в потенциале

$V(x)$. Таким образом задачу о двух частицах, взаимодействующих при помощи потенциала зависящего только от разности координат всегда можно свести к эффективной одночастичной задаче с приведенной массой μ.

Давайте проделаем все то же самое, но на этот раз не будем обращаться к координатному представлению. Итак, в исходной постановке мы имеем две пары канонически сопряженных операторов $\hat{p}_i$, $\hat{x}_i$ с коммутационными соотношениями $[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = -i\delta_{ij}$. Введем две новые пары операторов

$$\hat{X} = \frac{m_1\hat{x}_1 + m_2\hat{x}_2}{m_1 + m_2}, \quad \hat{x} = \hat{x}_1 - \hat{x}_2, \qquad \hat{P} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2, \quad \hat{p} = \frac{m_2\hat{p}_1 - m_1\hat{p}_2}{m_1 + m_2}, \tag{10}$$

которые также удовлетворяют каноническим коммутационным соотношениям $[\hat{P}, \hat{X}] = -i$, $[\hat{p}, \hat{x}] = -i$, откуда следует, что переход от одних координат к другим осуществляется при помощи унитарного преобразования. Оператор преобразования легко вычислить и он имеет вид

$$\hat{U} = e^{-i\hat{p}_1\hat{x}_2} e^{i\frac{m_1}{m_1+m_2}\hat{p}_2\hat{x}_1} \tag{11}$$

При этом

$$\hat{x} = \hat{U}\hat{x}_1\hat{U}^\dagger, \quad \hat{p} = \hat{U}\hat{p}_1\hat{U}^\dagger, \quad \hat{X} = \hat{U}\hat{x}_2\hat{U}^\dagger, \quad \hat{P} = \hat{U}\hat{p}_2\hat{U}^\dagger. \tag{12}$$

и Гамильтониан может быть представлен в виде

$$\hat{H} = \hat{U}\left(\frac{\hat{p}_2^2}{2(m_1 + m_2)} + \frac{\hat{p}_1^2}{2\mu} + V(\hat{x}_1)\right)\hat{U}^\dagger, \tag{13}$$

что и отвечает произведенному нами разделению переменных.

III. ДВУМЕРНАЯ ЧАСТИЦА В ЦЕНТРАЛЬНОМ ПОЛЕ

В качестве еще одного примера рассмотрим двумерную частицу, которая движется в центрально-симметричном потенциале, или, иными словами, в потенциале, который зависит только от расстояния до начала координат $V(x, y) = V(\sqrt{x^2 + y^2})$. Уравнение Шредингера при этом имеет вид

$$-\frac{\partial_x^2\psi(x, y) + \partial_y^2\psi(x, y)}{2m} + V(\sqrt{x^2 + y^2})\psi(x, y) = E\psi(x, y). \tag{14}$$

В этом случае удобно перейти в полярные координаты

$$x = \rho\cos(\theta), \qquad y = \rho\sin(\theta). \tag{15}$$

В этих координатах уравнение Шредингера принимает вид

$$-\frac{1}{2m\rho}\partial_\rho\left(\rho\partial_\rho\tilde{\psi}(\rho,\theta)\right)-\frac{1}{2m\rho^2}\partial_\theta^2\tilde{\psi}(\rho,\theta)+V(\rho)\tilde{\psi}(\rho,\theta)=E\tilde{\psi}(\rho,\theta). \tag{16}$$

Заметим, что хотя гамильтониан и не является суммой двух отдельных независимых систем, но тем ни менее можно разделить задачу на две независимые. Во-первых рассмотреть задачу с Гамильтонианом $\hat{H}_\theta=\hat{L}^2$, где $\hat{L}=-i\partial_\theta$. Данный оператор действует на Гильбертовом пространстве периодических функций с периодом 2π и скалярным произведением

$$\langle\psi|\chi\rangle=\int_0^{2\pi}\frac{d\theta}{2\pi}\psi^*(\theta)\chi(\theta) \tag{17}$$

После этого следует рассмотреть вторую задачу с Гамильтонианом

$$\hat{H}_{\rho,n}=-\frac{1}{2m}\partial_\rho^2-\frac{1}{2m\rho}\partial_\rho+\frac{E_{\theta,n}}{2m\rho^2}+V(\rho), \tag{18}$$

где $E_{\theta,n}$ - собственные значения оператора $\hat{H}_\theta$. Оператор действует на Гильбертовом пространстве функций на прямой со скалярным произведением

$$\langle\psi|\chi\rangle=2\pi\int_0^{\infty}\rho d\rho\psi^*(\rho)\chi(\rho). \tag{19}$$

После такого разделения переменных собственные состояния легко находятся.

IV. СИММЕТРИИ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

В заключение данной лекции давайте кратко проследим причину, по которой нам удалось произвести разделение переменных. Она кроется в виде Гамльтониана. В первом случае система была инвариантна относительно сдвигов, поскольку потенциал взаимодействия зависел только от разности координат. Каждая непрерывная симметрия связана с законом сохранения, который в квантовой механике связан с самосопряженным оператором, коммутирующем с гамильтонианом. В этом случае таким оператором был $\hat{P}$. Во втором случае в системе присутствует вращательная симметрия и оператором коммутирующим с Гамильтонианом является момент импульса $\hat{L}=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x$. Почему наличие симметрии помогает? Дело в том, что у коммутирующих операторов существует совместный набор собственных векторов. Это означает, что все Гильбертово пространство можно разбить на сумму подпространств, являющихся собственными для соответствующего оператора сохраняющейся величины. После этого, задача поиска собственных векторов Гамильтониана может решаться по отдельности на каждом из подпространств. Это и уменьшает размерность задачи.