Применение суперсимметрии для поиска спектра энергий гамильтонианов в задачах квантовой механики

Автор
Шахназаров Александр Анастасович
Руководитель
Созинов Егор Станиславович

Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”
Институт лазерных и плазменных технологий
кафедра №31 “Прикладная математика”
г. Москва 2021

Аннотация

В данной работе рассматривается математическая основа, необходимая для построения суперсимметричной модели, основные свойства суперсимметрии и примеры применения данного метода для поиска спектра энергий гамильтонианов.

Необходимая математика

$[a, b] = a\,b - b\,a$ - коммутатор

$\{a, b\} = a\,b + b\,a$ - антикоммутатор

a^{+} – оператор эрмитово сопряженный к a

Пусть $\left[a, a^{+}\right] = 1$

Если $a^{+}\,a\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle$, где $|\alpha\rangle$ – где $|\alpha\rangle$ – собственный вектор, то $\alpha = \langle\alpha|$

$$a^{+}\,a\,|\alpha\rangle = \|a\,|\alpha\rangle\|^{2} \geq 0,$$

т.е. все собственные значеня α неотрицательны
и
действительны.

С помощью свойств коммутатора и условия для α получим

$$a^{+} \, |n\rangle = \sqrt{n+1} \, |n+1\rangle$$

$$a \, |n\rangle = \sqrt{n} \, |n-1\rangle$$

Операторы a^{+} и a называют опреаторами рождения и уничтожения.

Бозонный и фермионный осциллятор

Рассмотрим простой гармонический осциллятор. Его гамильтониан (оператор, спектр которого - множество возможных значений полной энергии системы) имеет вид:

$$H = \frac{1}{2\,m} p^2 + \frac{m\,\omega^2}{2} x^2,$$

где x и p - операторы координат и импульса частицы, удовлетворяющие соотношению

$[x, p] = i\,\hbar$

Пусть

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}\, x + i\, \frac{1}{\sqrt{m\,\omega\,\hbar}}\, p\right)$$

$$a^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}\, x - i\, \frac{1}{\sqrt{m\,\omega\,\hbar}}\, p\right)$$

Пользуясь свойством x и p, получим

$[a, a^{+}] = 1$ (верно для бозонов)

Тогда

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\,\omega}}\, \frac{a + a^{+}}{\sqrt{2}}$$

$$p = \sqrt{\hbar\,m\,\omega}\, \frac{a - a^{+}}{i\,\sqrt{2}}$$

Отсюда

$$H = \frac{\hbar\,\omega}{2} \left(a^{+}\,a + a\,a^{+}\right) = \hbar\,\omega \left(a^{+}\,a + \frac{1}{2}\right)$$

Следовательно, собственные состояния H являются собственными состояниями a^{+} a. Воспользуемся тем, что уже получили для a^{+} a:

$H\,|n\rangle = \hbar\,\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) |n\rangle$ – (бозонный осциллятор)

Таким образом, энергетические уровни определяются соотношением

$$E_n = \hbar\,\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Пусть теперь

$\{a, a^{+}\} = 1$ (верно для фермионов), тогда, рассуждая аналогичным образом, получим для фермионного осциллятора

$n = 0, 1$

$$E_n = \hbar\,\omega \left(n - \frac{1}{2}\right) = \pm \frac{1}{2}\,\hbar\,\omega$$

Суперсимметричный гамильтониан

В дальнейшем для бозонов будем обозначать операторы рождения и уничтожения как b^+ и b, а для фермионов как f^+ и f.

Для бозонных и фермионных операторов выполняются следующие свойства :

$$[b,\ b^+] = 1$$

$$\{f,\ f^+\} = 1$$

$f^2 = f^{+2} = 0$ – нильпотентность

$[b, f] = 0$

Определим операторы, переводящие бозоны в фермионы и наоборот .

В простейшем случае действие таких операторов $Q_\pm$ может быть следующим :

$$Q_+ \mid n_b,\ n_f\rangle \propto \mid n_b - 1,\ n_f + 1\rangle$$

$$Q_- \mid n_b,\ n_f\rangle \propto \mid n_b + 1,\ n_f - 1\rangle,$$

где n_b, n_f – бозонные и фермионные числа заполнения,

т.е. оператор Q_+ превращает бозон в фермион,

а Q_- – наоборот, фермион в бозон. Выражая эти операторы через операторы рождения и уничтожения, получаем

$$Q_+ = q\, b\, f^+$$

$$Q_- = q\, b^+ f$$

где q – произвольная константа, одна и та же для того, чтобы Q_+ и Q_- были сопряжены друг другу.

Благодаря наличию фермионных операторов операторы $Q_\pm$ также являются нильпотентными.

Определим теперь Q_1 и Q_2 :

$$Q_1 = Q_+ + Q_-$$

$$Q_2 = -i\ (Q_+ - Q_-)$$

Очевидно, что

$$\{Q_1,\ Q_2\} = 0$$

$$Q_1^2 = Q_2^2 = \{Q_+,\ Q_-\}$$

Эти соотношения подсказывают вид простейшего гамильтониана H, инвариантного относительно преобразований, перемешивающих бозоны и фермионы, т . е . обладающего суперсимметрией :

$$H = Q_1^2 = Q_2^2 = \{Q_+,\ Q_-\}$$

Из условия нильпотентности следует :

$[H, Q] = 0$

Двукратное вырождение уровней гамильтониана

Рассмотрим Q_1 и возьмем одно из состояний этой системы, для которого

$Q_1\, \psi_1 = q\, \psi_1$

$H\, \psi_1 = q^2\, \psi_1$

Покажем, что оператор Q_2 переводит ψ_1 снова в собственный вектор оператора Q_1, но с противоположным по знаку собственным значением. Обозначим

$\psi_2 = Q_2\, \psi_1$

Получаем

$Q_1\, \psi_2 = Q_1\, Q_2\, \psi_1 = -Q_2\, Q_1\, \psi_1 = -q\, Q_2\, \psi_1 = -q\, \psi_2$

С другой стороны, поскольку $[H, Q_2] = 0$

$H\, \psi_2 = H\, Q_2\, \psi_1 = Q_2\, H\, \psi_1 = q^2\, Q_2\, \psi_1 = q^2\, \psi_2$

т.е. ψ_2 является также собственным состоянием гамильтониана H,
с тем же собственным значением, что и ψ_1. Таким образом, если $q \neq 0$,
т.е. $E = q^2 > 0$, рассматриваемый уровень гамильтониана двукратно вырожден.

Суперпотенциал

Заметим теперь, что нильпотентный характер операторов $Q_\pm$ сохранится,
если мы обобщим полученную модель следующим образом :

$Q_+ = B^- \left(b, b^+\right) f^+$

$Q_- = B^+ \left(b, b^+\right) f,$

где $B^\pm$ – произвольные функции бозонных операторов
(сопряженные друг другу, чтобы Q_+ и Q_- оставались сопряженными).
По этой причине гамильтониан H с операторами $Q_\pm$ по-прежнему останется суперсимметричным. Однако при этом он
уже не будет квадратичным по бозонным операторам,
т.е. будет включать взаимодействие между «бозонами», а кроме того,
будет включать и взаимодействие между «бозонами» и «фермионами».

Поскольку фермионное число заполнения может принимать только два значения $n_f = 0$, 1, удобно выбрать представление для векторов состояний,
в котором волновые функции являются двукомпонентными :

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix}$$

где верхняя компонента ψ_1 соответствует $n_f = 1$, а нижняя ψ_0 соответствует $n_f = 0$.

В рассматриваемом представлении гамильтониан H принимает вид

$$H = \frac{1}{2}\{B^-, B^+\} + \frac{1}{2}[B^-, B^+]\,\sigma_3,$$

где

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Если гамильтониан H квадратичен по импульсам p, то операторы B имеют вид

$$B^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(\mp i\,p + W[x]),$$

где $W[x]$ – произвольная функция координаты x. Суперсимметричному осциллятору соответствует $W[x] = x$ – при этом $B^\pm = b^\pm$.

Подставляя полученное в последнюю формлулу для H, получаем

$$H = \frac{1}{2}\left(p^2 + W^2[x] + \sigma_3\, W'[x]\right)$$

Это гамильтониан «суперсимметричной квантовой механики Виттена». Он обладает важным свойством, сохраняющимся во всех суперсимметричных моделях: взаимодействие бозонов с бозонами (в данном случае член $W^2[x]$) и фермионов с бозонами (в данном случае $\sigma_3\, W'[x]$) определяются одной и той же функцией $W[x]$. Мы будем в дальнейшем называть эту функцию «суперпотенциалом».

Суперпотенциал и нулевая энергия

Прежде всего, для этого гамильтониана сохраняется двукратное вырождение энергетических уровней с энергией $E > 0$ при произвольной функции W [x], поскольку это вырождение обусловлено только наличием суперсимметрии. Далее, для суперсимметричного осциллятора энергия основного состояния в точности равна нулю, и это нулевое состояние - единственное невырожденное. Сохранится ли это свойство в более общем случае, когда включено взаимодействие?

Чтобы рассмотреть вопрос об основном состоянии гамильтониана, удобно представить его в матричном виде:

$$H = \begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix},$$

где $H_+ = B^- B^+$, $H_- = B^+ B^-$

Гамильтонианы $H_\pm$ действуют в пространстве однокомпонентных волновых функций, причем каждый из них факторизован, т.е. имеет вид произведения двух сопряженных друг другу диффренциальных операторов первого порядка. Благодаря этому задача определения состояния с энергией $E = 0$ сводится к нахождению решений уравнений $B^+\,\psi = 0$ или $B^-\,\psi = 0$.

Из $B^-\,\psi = 0$ очевидным образом следует $H_-\,\psi = 0$. С другой стороны, из $H_- \psi = 0$ следует $B^- \psi = 0$, поскольку $H_- = B^- B^+$:

$$0 = \langle \psi | B^+ B^- | \psi \rangle = \| B^- | \psi \rangle \|^2$$

Обозначим решения уравнений $B^\pm \psi = 0$ через $\psi_\pm$. Индексы $\pm$ соответствуют знаку собственных значений σ_3. Запишем уравнения $B^\pm \psi = 0$ в виде

$$\left(\frac{d}{dx} \mp W\right) \psi_\pm = 0$$

Решения этих уравнений имеют вид

$$\psi_\pm = C \exp\left[\pm \int_0^x W(x')\, dx'\right]$$

Однако для того чтобы функции $\psi_\pm$ действительно являлись собственными функциями гамильтониана H, необходимо, чтобы они были квадратично интегрируемыми. Тогда для квадратичной интегрируемости ψ_- необходимо, чтобы

$$\int_0^x W(x')\, dx' \to \infty, \quad x \to \pm\infty$$

Для ψ_+

$$\int_0^x W(x')\, dx' \to -\infty, \quad x \to \pm\infty$$

Очевидно, условия и несовместимы, и поэтому только одна из функций $\psi_\pm$ может быть нормируемой. Однако может оказаться, что ни одна из этих функций не нормируема. Таким образом, если состояние с энергией $E = 0$ существует, то оно невырождено, этому состоянию отвечает та из функций $\psi_\pm$, которая является нормируемой. Если ни одно из условий не выполнено то нормируемой функции, соответствующей состоянию с энергией $E = 0$ не существует и вследствие неотрицательности спектра суперсимметричного гамильтониана основное состояние имеет энергию $E_0 > 0$.

Примеры применения суперсимметрии

Этот гамильтониан можно рассматривать как совокупность 2 обычных одномерных гамильтонианов

$$H_\pm = \frac{1}{2}\left(p^2 + W^2[x] \pm W'[x]\right)$$

которые, благодаря суперсимметрии, имеют одинаковый спектр при произвольной функции $W[x]$. Исключение может составлять только низший уровень одного из $H_\pm$, и его энергия в этом случае точно равна нулю. Именно эти два свойства суперсимметричных теорий: двукратное вырождение всех уровней с энергией $E > 0$ и равенство нулю энергии основного состояния, если оно невырождено, можно использовать для нахождения точного спектра. Приведем характерный пример такого определения спектра.

Пусть W[a, x] = a th x

При x -> ±∞ суперпотенциал W имеет различные знаки . Если a > 0, то нулевым уровнем обладает

$$H_-[a] = \frac{1}{2}\left(p^2 + W^2[x] - W'[x]\right) = \frac{1}{2}\left(p^2 - \frac{a\,(a+1)}{\mathrm{ch}^2\, x}\right) + \frac{a^2}{2}$$

Для H_+ получаем

$$H_+[a] = \frac{1}{2}\left(p^2 - \frac{a\,(a-1)}{\mathrm{ch}^2\, x}\right) + \frac{a^2}{2}$$

Обозначим $a_1 = a - 1$, тогда

$$H_+[a] = H_-[a_1] + \frac{a^2}{2} - \frac{a_1{}^2}{2}$$

Если $a_1 > 0$, то нижний уровень для гамильтониана $H_-[a_1]$ снова равен нулю, и поэтому полученное уравнение позволяет определить нижний уровень гамильтониана $H_+[a]$:

$$E_1 = \frac{a^2 - a_1{}^2}{2}$$

Но уровни $H_+[a]$ и $H_-[a]$ совпадают, за исключением нижнего уровня $H_-[a]$, и поэтому E_1 есть энергия следующего за основным (нулевым) уровнем гамильтониана $H_-[a]$. Таким образом, мы уже знаем два уровня гамильтониана $H_-[a]$: $E_0 = 0$ и E_1.

Описанную процедуру можно повторять, делая на каждом шагу замену $a_n = a_{n-1} - 1 = a - n$ до тех пор пока $a_n \geq 0$. В результате мы получим полный дискретный спектр гамильтониана $H_-[a]$: энергия n – го уровня дается формулой

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

С целью обобщения рассмотренного примера заметим, что гамильтонианы H_+ и H_- отличались в данном случае только значениями параметров (включая аддитивную константу) – именно это свойство позволило построить итерационную процедуру нахождения спектра. Естественно поставить задачу о нахождении всех потенциалов, удовлетворяющих такому условию «форминвариантности». Оказалось, что к числу потенциалов, для которых указанным способом можно найти спектры с помощью элементарных вычислений, относятся все точно решенные до сих пор задачи одномерной квантовой механики на всей оси x.

С помощью суперсимметрии можно находить спектры и других гамильтонианов, например :

$$W = \frac{e^2}{2\,(l+1)} - \frac{l+1}{r},\ 0 < r < \infty$$

$$H_{\pm} = \frac{1}{2}\left(p^2 + W^2 \pm W'\right) = \frac{1}{2}\left(p^2 + \frac{e^4}{4\,(l+1)^2} + \frac{(l+1)^2}{r^2} - \frac{e^2}{r} \pm \frac{l+1}{r^2}\right) -$$

гамильтониан спектра энергий атома водорода

$$V_- = \frac{l\,(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{r} + \frac{e^4}{4\,(l+1)^2}$$

$$V_+ = \frac{(l+2)\,(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{r} + \frac{e^4}{4\,(l+1)^2}$$

$$V_+[l] = V_-[l+1] - \frac{e^4}{4\,(l+2)^2} + \frac{e^4}{4\,(l+1)^2} = V_-[l+1] - g[(l+1)+1] + g[l+1]$$

$$E_-^n = \frac{1}{2}\,(-g[l+n+1] + g[l+1])$$

$$E_-^n = -\frac{e^4}{8\,(l+n+1)^2}$$

Потенциал Морзе

$$W = A - e^{-x},\ -\infty < x < \infty$$

$$H_{\pm} = \frac{1}{2}\left(p^2 + W^2 \pm W'\right) = \frac{1}{2}\left(p^2 + A^2 - 2\,A\,e^{-x} + e^{-2\,x} \pm e^{-x}\right)$$

$$V_- = A^2 + e^{-2\,x} - (2\,A+1)\,e^{-x}$$

$$V_+ = A^2 + e^{-2\,x} - (2\,A-1)\,e^{-x}$$

$$V_+[A] = V_-[A-1] - (A-1)^2 + A^2 = V_-[A-1] - g[A-1] + g[A]$$

$$E_-^n = \frac{1}{2}\,(-g[A-n\,] + g[A])$$

$$E_-^n = \frac{-\,(A-n)^2}{2}$$

Потенциал Пёшль - Теллера

W = h tg[x] - λ ctg[x]

$$W' = \frac{h}{\cos^2[x]} + \frac{\lambda}{\sin^2[x]}$$

$$W^2 = (h\,\mathrm{tg}[x] - \lambda\,\mathrm{ctg}[x])^2 = h^2\,\mathrm{tg}^2[x] - 2\,h\,\lambda + \lambda^2\,\mathrm{ctg}^2[x]$$

$$W^2 \pm W' =$$
$$H^2\left(\sin^2[x] \big/ \cos^2[x]\right) \pm h \big/ \cos^2[x] + \lambda^2\left(\cos^2[x] \big/ \sin^2[x]\right) \pm \lambda \big/ \cos^2[x] - 2\,h\,\lambda =$$
$$(h\,(h\pm 1)) \big/ \cos^2[x] + (\lambda\,(\lambda\pm 1)) \big/ \sin^2[x] - (\lambda+h)^2$$

$$H_{\pm} = \frac{1}{2}\left(p^2 + \frac{h\,(h \pm 1)}{\cos^2[x]} + \frac{\lambda\,(\lambda \pm 1)}{\sin^2[x]} - (\lambda + h)^2\right)$$

$$H_- < H_+ \to \exists\, \psi_0 : H_-\, \psi_0 = 0$$

$$H_-\, \psi_0 = 0$$

$$V_-[h + 1, \lambda + 1] = \frac{h\,(h + 1)}{\cos^2[x]} + \frac{\lambda\,(\lambda + 1)}{\sin^2[x]} - (\lambda + h + 2)^2$$

$$V_+[h, \lambda] = \frac{h\,(h + 1)}{\cos^2[x]} + \frac{\lambda\,(\lambda + 1)}{\sin^2[x]} - (\lambda + h)^2 = V_-[h + 1, \lambda + 1] + (\lambda + h + 2)^2 - (\lambda + h)^2 =$$

$$V_-[h + 1, \lambda + 1] + g[(\lambda + h) + 2 \times 1] - g[(\lambda + h)]$$

$$E_-^n = \frac{1}{2}\,(g[(\lambda + h) + 2\,n] - g[(\lambda + h)]) = \frac{1}{2}\,\left((\lambda + h + 2\,n)^2 - (\lambda + h)^2\right) \to V\,(x) =$$

$$\frac{1}{2}\left(\frac{h\,(h - 1)}{\cos^2[x]} + \frac{\lambda\,(\lambda - 1)}{\sin^2[x]}\right) \to E_-^n = \frac{1}{2}\,(\lambda + h + 2\,n)^2$$

Список литературы

|1| Фейнман Р.Ф. “Статистическая механика. Курс лекций”

|2| Генденштейн Л.Э., Криве И.В. “Суперсимметрия в квантовой механике”