

Symetrie v kvantové mechanice, translace

Martin Štefaňák

22. února 2021

1 Symetrie v kvantové mechanice

2 Translace

Využití symetrií v kvantové mechanice

- Symetrie — invariance vůči nějakým transformacím
- Grupa transformací G — asociativní, existuje jednotka e a inverzní prvek

$$g_1, g_2 \rightarrow g_1 \cdot g_2, \quad \forall g \exists_1 g^{-1}, \quad g \cdot g^{-1} = g^{-1} \cdot g = e$$

- Spojité prostorové transformace — translace, rotace
- Diskrétní symetrie — prostorová inverze (parita), časová inverze
- Spojité transformace jsou generovány pozorovatelnými
- Generátory symetrií jsou integrály pohybu
- Symetrie pomáhají vybrat kompatibilní pozorovatelné, najít společné vlastní vektory
- Např. částice ve sféricky symetrickém poli — $\hat{H}$, $\hat{L}_3$ a $\hat{L}^2$ jsou kompatibilní, přechodem do sférických souřadnic separujeme proměnné (řešíme vždy jen ODR)
- Symetrie usnadňují výpočet maticových elementů

Transformace v kvantové mechanice

- V QM pracujeme v nějakém Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$
- Transformace jsou v $\mathcal{H}$ realizovány pomocí reprezentace grupy G

$$g \in G \longmapsto \hat{U}(g), \quad \hat{U}(g_1.g_2) = \hat{U}(g_1).\hat{U}(g_2)$$

- Transformace stavů

$$|\psi\rangle \longmapsto |\psi_g\rangle = \hat{U}(g)|\psi\rangle$$

- Transformace musí zachovávat amplitudy přechodu mezi stavy

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi_g|\phi_g\rangle = \langle\psi|\hat{U}(g)^\dagger\hat{U}(g)|\phi\rangle \implies \hat{U}(g)^\dagger\hat{U}(g) = \hat{I}$$

- Spojité transformace a parita jsou reprezentovány lineárními unitárními operátory
- Časová inverze je reprezentována antilineárním unitárním operátorem $\hat{T}$

$$\hat{T}(|\psi_1\rangle + c|\psi_2\rangle) = \hat{T}|\psi_1\rangle + \bar{c}\hat{T}|\psi_2\rangle$$

Aktivní a pasivní interpretace transformací

Aktivní interpretace

- Transformujeme systém do nového stavu

$$|\psi\rangle \mapsto |\psi_g\rangle = \hat{U}(g)|\psi\rangle$$

- Souřadný soustava a pozorovatelné se nemění

Pasivní interpretace

- Popisujeme stejný fyzikální stav z pohledu transformované soustavy S'
- Transformujeme pozorovatelné (v opačném směru, tj. g^{-1})

$$\hat{A} \mapsto \hat{A}' = \hat{A}_{g^{-1}} = \hat{U}(g^{-1})\hat{A}\hat{U}^\dagger(g^{-1}) = \hat{U}(g)^\dagger\hat{A}\hat{U}(g)$$

$$\langle\psi_g|\hat{A}|\phi_g\rangle = \langle\psi|\hat{U}(g)^\dagger\hat{A}\hat{U}(g)|\phi\rangle = \langle\psi|\hat{A}_{g^{-1}}|\phi\rangle$$

$$\langle\psi_g|\hat{A}_g|\phi_g\rangle = \langle\psi|\hat{U}(g)^\dagger\hat{U}(g)\hat{A}\hat{U}^\dagger(g)\hat{U}(g)|\phi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle$$

Spojité transformace

- Jednparametrická ábelovská (komutativní) grupa transformací $G = (g, +)$
- Unitární reprezentace $\hat{U}(g)$ na $\mathcal{H}$

$$\hat{U}(g_1 + g_2) = \hat{U}(g_1) \cdot \hat{U}(g_2), \quad \hat{U}(0) = \hat{I}$$

- Předpokládáme spojitost funkce $\langle \psi | \hat{U}(g) | \phi \rangle, \forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$

Stoneův teorém

$\hat{U}(g)$ je generována samosdruženým operátorem $\hat{B}$

$$\hat{U}(g) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} g \hat{B}\right), \quad \hat{B} = i\hbar \left. \frac{d\hat{U}(g)}{dg} \right|_{g=0} = \hat{B}^\dagger$$

- Obecněji pro reprezentaci r -parametrické grupy $\hat{U}(\mathbf{g})$ (v okolí jednotky)

$$\hat{U}(\mathbf{g}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} g_j \hat{B}_j\right), \quad \hat{B}_j = i\hbar \left. \frac{\partial \hat{U}(\mathbf{g})}{\partial g_j} \right|_{\mathbf{g}=0} = \hat{B}_j^\dagger$$

Spojité transformace

- Spojité prostorové transformace (rotace, translace) tvoří Lieovu grupu — diferencovatelná varieta, grupové operace jsou hladké
- $\hat{U}(\mathfrak{g})$ jsou unitární reprezentace Lieovy grupy na $\mathcal{H}$
- K Lieově grupě existuje Lieova algebra — tečný prostor v jednotce
- Generátory $\hat{B}_j$ jsou samosdružená reprezentace Lieovy algebry

Rotace

- Grupa rotací $\mathbb{R}^3$ — Lieova grupa $SO(3)$ — ortogonální matice 3x3
- Rotace o úhel α okolo osy $\vec{n}$ — reprezentace na $\mathcal{H}$

$$\hat{R}_{\vec{n}}(\alpha) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\alpha\vec{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right)$$

- Generátory rotací $\hat{J}_k$ — reprezentace Lieovy algebry $su(2)$ — moment hybnosti

$$[\hat{J}_k, \hat{J}_l] = i\hbar\varepsilon_{klm}\hat{J}_m$$

Symetrie a jejich generátory

- G je grupa symetrií systému $\iff$ akce G ponechává hamiltonián beze změny

$$\hat{H}_g = \hat{U}(g)\hat{H}\hat{U}^\dagger(g) = \hat{H} \iff [\hat{U}(g), \hat{H}] = 0$$

- Infinitesimální transformace

$$\hat{U}(\varepsilon) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{B}\right) \simeq \hat{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{B}$$

- Generátor symetrie je integrál pohybu

$$\hat{H}_\varepsilon \simeq \left(\hat{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{B}\right) \hat{H} \left(\hat{1} + \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{B}\right) \simeq \hat{H} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon [\hat{B}, \hat{H}] \stackrel{!}{=} \hat{H} \iff [\hat{B}, \hat{H}] = 0$$

Symetrie a degenerace energií

- Hamiltonián s bodovým spektrem — $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$
- Grupa symetrií G — $[\hat{H}, \hat{U}(g)] = 0$
- Symetrie převádí $|\psi_n\rangle$ opět na vlastní vektory se stejným vlastním číslem

$$|\psi_n, g\rangle = \hat{U}(g)|\psi_n\rangle \implies \hat{H}|\psi_n, g\rangle = \hat{H}\hat{U}(g)|\psi_n\rangle = \hat{U}(g)\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n, g\rangle$$

- $|\psi_n, g\rangle$ nemusí být různé, ale pokud jsou — degenerace spektra

Sférický symetrický potenciál

- $\hat{H}$ je invariantní vůči rotacím, komutuje s generátory — moment hybnosti
- Společné vlastní vektory s $\hat{L}_3$ a $\hat{L}^2$ — $|n, l, m\rangle$

$$\hat{L}_3|n, l, m\rangle = m\hbar|n, l, m\rangle, \quad \hat{L}^2|n, l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|n, l, m\rangle, \quad \hat{H}|n, l, m\rangle = E_{n,l}|n, l, m\rangle$$

- Energie nezávisí na magnetickém kvantovém čísle
- Hladina $E_{n,l}$ má degeneraci alespoň $2l + 1$

Časový vývoj jako spojitá transformace

- Časový vývoj uzavřeného systému je popsán unitárním evolučním operátorem

$$|\psi(t_0)\rangle \longmapsto |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}, \quad \hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = \hat{I}$$

- Systém nezávislý na čase — generátor časového vývoje je Hamiltonián

$$\hat{U}(t, t_0) \equiv \hat{U}(t - t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t - t_0)\right)$$

- Schrödingerova rovnice plyne z tvaru $\hat{U}(t - t_0)$

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t - t_0)|\psi(t_0)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}(t - t_0)|\psi(t_0)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle$$

- Pro systémy s $\hat{H}(t)$ musíme postulovat Schrödingerovu rovnici

$$\hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t, t_0)$$

Změna středních hodnot při transformacích

- Změna středních hodnot $\hat{A}$ (nezávislé na čase) při časovém vývoji

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle_{\psi(t)} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H}, \hat{A}]\rangle_{\psi(t)}, \quad \hat{A} \text{ je IP} \iff [\hat{H}, \hat{A}]$$

- Analogicky pro libovolnou spojitou transformaci $\hat{U}(g)$

$$|\psi_g\rangle = \hat{U}(g)|\psi\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}g\hat{B}\right)|\psi\rangle \implies \frac{d}{dg}|\psi_g\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{B}|\psi_g\rangle$$

- Změna střední hodnoty $\hat{A}$ při spojitě transformaci $\hat{U}(g)$

$$\frac{d}{dg}\langle\hat{A}\rangle_{\psi_g} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{B}, \hat{A}]\rangle_{\psi_g}, \quad \frac{d}{dg}\langle\hat{A}\rangle_{\psi_g} = 0 \iff [\hat{B}, \hat{A}]$$

- $\hat{A}$ se nemění při transformaci $\hat{U}(g) \iff \hat{A}$ komutuje s generátorem $\hat{B}$

$$\hat{A}_g = \hat{U}(g)\hat{A}\hat{U}^\dagger(g) \simeq \hat{A} - \frac{i}{\hbar}g[\hat{B}, \hat{A}] \stackrel{!}{=} \hat{A} \iff [\hat{B}, \hat{A}] = 0$$

- Grupa translací na přímce je ábelovská — $(\mathbb{R}, +)$, $T_a x = x + a$
- V QM — unitární reprezentace $\hat{T}_a$, definujeme vztahem $\hat{T}_a |x\rangle = |x + a\rangle$
- Působení na vlnové funkce

$$|\psi_a\rangle = \hat{T}_a |\psi\rangle \implies \psi_a(x) = \langle x | \psi_a \rangle = \langle x - a | \psi \rangle = \psi(x - a)$$

- Infinitesimální translace o $\varepsilon \ll 1$

$$\psi_\varepsilon(x) = \psi(x - \varepsilon) \simeq \psi(x) - \varepsilon \frac{d\psi}{dx} = \psi(x) - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{P} \psi(x)$$

- Generátorem translací je operátor hybnosti

$$\hat{T}_\varepsilon \simeq \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{P} \implies \hat{T}_a = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} a \hat{P}\right)$$

Translace v $\mathbb{R}^3$

- Grupa translací v $\mathbb{R}^3$ je ábelovská — $(\mathbb{R}^3, +)$, $T_{\vec{a}}\vec{x} = \vec{x} + \vec{a}$
- V QM — unitární reprezentace $\hat{T}_{\vec{a}}$, definujeme vztahem $\hat{T}_{\vec{a}}|\vec{x}\rangle = |\vec{x} + \vec{a}\rangle$
- Působení na vlnové funkce

$$|\psi_{\vec{a}}\rangle = \hat{T}_{\vec{a}}|\psi\rangle \implies \psi_{\vec{a}}(\vec{x}) = \psi(\vec{x} - \vec{a})$$

- Obecně pro prostorové transformace platí

$$|\psi_{\Lambda}\rangle = \hat{U}_{\Lambda}|\psi\rangle \implies \psi_{\Lambda}(\vec{x}) = \psi(\Lambda^{-1}\vec{x})$$

- Generátorem translace ve směru osy x_j je $\hat{P}_j$ — jsou kompatibilní

$$\hat{T}_{\vec{a}} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{a} \cdot \hat{\vec{P}}\right), \quad \hat{T}_{\vec{a}_1} \hat{T}_{\vec{a}_2} = \hat{T}_{\vec{a}_1 + \vec{a}_2}$$

Translace systému více částic

- Uvažujme dvě rozlišitelné částice v $\mathbb{R}^3$
- Změna dvoučásticové vlnové funkce při translaci o $\vec{a}$

$$\psi_{\vec{a}}(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) = \hat{T}_{\vec{a}}\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) = \psi(\vec{x}^{(1)} - \vec{a}, \vec{x}^{(2)} - \vec{a})$$

- Infinitesimální posunutí $|\vec{a}| \ll 1$

$$\psi_{\vec{a}}(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) \simeq \psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) - \vec{a} \cdot \vec{\nabla}^{(1)}\psi - \vec{a} \cdot \vec{\nabla}^{(2)}\psi = \psi - \frac{i}{\hbar}\vec{a} \cdot (\hat{\vec{P}}^{(1)} + \hat{\vec{P}}^{(2)})\psi$$

- Obecně je generátorem translací operátor celkové hybnosti

$$\hat{\vec{P}} = \hat{\vec{P}}^{(1)} + \hat{\vec{P}}^{(2)}, \quad \hat{T}_{\vec{a}} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{a} \cdot \hat{\vec{P}}\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{a} \cdot \hat{\vec{P}}^{(1)}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{a} \cdot \hat{\vec{P}}^{(2)}\right)$$

Transformace pozorovatelných při translacích

- Hybnost se při translacích nemění

$$[\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0 \implies [\hat{P}_i, \hat{T}_{\vec{a}}] = 0 \implies \hat{\vec{P}}_{\vec{a}} = \hat{T}_{\vec{a}} \hat{\vec{P}} \hat{T}_{\vec{a}}^\dagger = \hat{\vec{P}}$$

- Maticové elementy hybnosti se nemění

$$\langle \psi_{\vec{a}} | \hat{\vec{P}} | \phi_{\vec{a}} \rangle = \langle \psi | \hat{\vec{P}}_{-\vec{a}} | \phi \rangle = \langle \psi | \hat{\vec{P}} | \phi \rangle$$

- Operátor polohy se posune o $-\vec{a}$

$$[\hat{Q}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij} \implies [\hat{Q}_i, \hat{T}_{\vec{a}}] = i\hbar \frac{\partial \hat{T}_{\vec{a}}}{\partial p_i} = a_i \hat{T}_{\vec{a}} \implies \hat{\vec{Q}}_{\vec{a}} = \hat{T}_{\vec{a}} \hat{\vec{Q}} \hat{T}_{\vec{a}}^\dagger = \hat{\vec{Q}} - \vec{a}$$

- Analogicky se posunou maticové elementy

$$\langle \psi_{\vec{a}} | \hat{\vec{Q}} | \phi_{\vec{a}} \rangle = \langle \psi | \hat{\vec{Q}}_{-\vec{a}} | \phi \rangle = \langle \psi | \hat{\vec{Q}} | \phi \rangle + \vec{a} \langle \psi | \phi \rangle$$

Translační invariance

- Hamiltonián je translačně invariantní $\iff$ potenciál je konstantní

$$[\hat{H}, \hat{T}_{\vec{a}}] = 0 \iff \hat{H}_{\vec{a}} = \hat{T}_{\vec{a}} \hat{H} \hat{T}_{\vec{a}}^\dagger = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \hat{V}(\hat{\vec{Q}} - \vec{a}) \stackrel{!}{=} \hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \hat{V}(\hat{\vec{Q}}) \iff \hat{V} = \text{const}$$

- Jedna částice — hybnost se zachovává jen pro volnou částici
- Dvě částice, centrální síla — $V(\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)})$ — zachovává se celková hybnost
- Redukce úlohy dvou těles

$$\begin{aligned}\hat{\vec{R}} &= \frac{M_1 \hat{\vec{Q}}^{(1)} + M_2 \hat{\vec{Q}}^{(2)}}{M_1 + M_2}, \quad \vec{r} = \hat{\vec{Q}}^{(1)} - \hat{\vec{Q}}^{(2)}, \quad \hat{\vec{P}} = \hat{\vec{P}}^{(1)} + \hat{\vec{P}}^{(2)}, \quad \hat{\vec{p}} = \frac{M_2 \hat{\vec{P}}^{(1)} - M_1 \hat{\vec{P}}^{(2)}}{M_1 + M_2} \\ \hat{H} &= \frac{\hat{P}^{(1)2}}{2M_1} + \frac{\hat{P}^{(2)2}}{2M_2} + \hat{V}(\hat{\vec{Q}}^{(1)} - \hat{\vec{Q}}^{(2)}) = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \hat{V}(\hat{\vec{r}}) = \hat{H}_t + \hat{H}_r\end{aligned}$$

- $\hat{H}$ nezávisí na $\hat{\vec{R}}, \hat{\vec{r}}$ se při translacích nemění — $[\hat{H}, \hat{T}_{\vec{a}}] = 0$, resp. $[\hat{H}, \hat{P}_j] = 0$

- Částice v periodickém potenciálu $V(x + a) = V(x)$, $a \in \mathbb{R}$
- $[\hat{H}, \hat{T}_{na}] = 0$, $n \in \mathbb{Z} \implies$ mají společné (zobecněné) vlastní funkce
- Vlastní funkce hamiltoniánu jsou mají tvar Blochovy vlny

$$\hat{H}\psi_q = E(q)\psi_q, \quad \psi_q(x) = e^{iqx}u_q(x), \quad u_q(x + a) = u_q(x)$$

- Analogicky v $\mathbb{R}^3$ — potenciál krystalové mříže $V(\vec{x} + n_j\vec{a}_j) = V(\vec{x})$, $n_j \in \mathbb{Z}$, $j = 1, 2, 3$

$$\hat{H}\psi_{\vec{q}} = E(\vec{q})\psi_{\vec{q}}, \quad \psi_{\vec{q}}(\vec{x}) = e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}u_{\vec{q}}(\vec{x}), \quad u_{\vec{q}}(\vec{x} + \vec{a}_j) = u_{\vec{q}}(\vec{x})$$

- Vlastnosti Blochovy vlny usnadňují nalezení spektra $\hat{H} \rightarrow E(q)$
- Pro periodické potenciály má spojitě spektrum $\hat{H}$ pásovou strukturu — střídají se povolené a zakázané energetické pásy

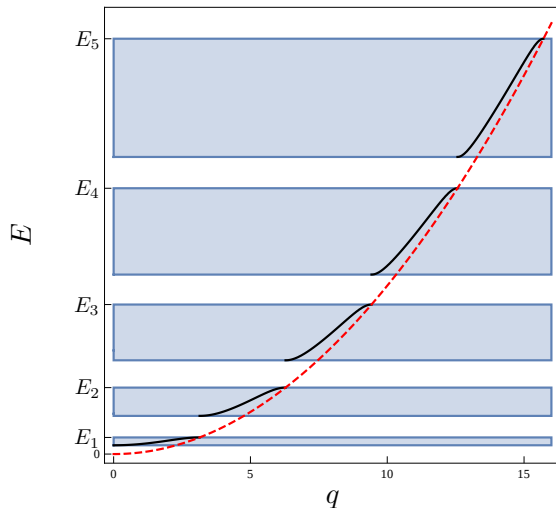
Diracův hřeben — cvičení

- Potenciál — periodicky se opakující δ -funkce se silou α

$$V(x) = \alpha \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na), \quad \alpha > 0$$

- Energie je určena implicitním vztahem ($k = \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}$)

$$\cos(aq) = \cos(ak) + \frac{M\alpha}{\hbar^2 k} \sin(ak)$$



Pásová struktura spektra — $|PS| \leq 1$, jinak rovnice nemá řešení