Лекция 15

Суперсимметричная квантовая механика

15.1 Суперзаряды

Мы рассмотрим только самые простые примеры из суперсимметричной квантовой механики. Желающих ознакомиться с данной областью подробнее отсылаем к обзору [39]. Операторы рождения и уничтожения $a^\dagger, a$ в квантовой механике обладают разными свойствами для бозонов или фермионов. Мы будем пользоваться теми и другими, поэтому обозначим их различными буквами.

Бозоны

Число бозонов $n = 0, 1, 2, \ldots$ может быть произвольным. Операторы $b^+(b^-)$ увеличивают (уменьшают) n на единицу:

$$b^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad b^-|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle,$$

откуда для диагонального матричного элемента получается

$$\langle n|b^-b^+ - b^+b^-|n\rangle = (\sqrt{n+1})^2 - (\sqrt{n})^2 = 1.$$

Недиагональные матричные элементы обращаются в нуль, поэтому кратко можно записать свойства в виде одного коммутатора

$$\left[b^-, b^+\right] = 1. \tag{15.1}$$

Фермионы

Согласно принципу Паули имеется только две возможности $n = 0, 1$, тогда действие операторов f^-, f^+ определяется четырьмя соотношениями

$$\begin{aligned} f^+|0\rangle &= |1\rangle, \qquad f^-|1\rangle = |0\rangle, \\ f^+|1\rangle &= 0, \qquad f^-|0\rangle = 0. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что $f^- f^+ = |1\rangle\langle 1|$, $f^+ f^- = |0\rangle\langle 0|$, а их сумма будет тождественным оператором. Все можно записать в виде одного антикоммутатора

$$\left\{f^-, f^+\right\} = 1. \tag{15.2}$$

Введем новые операторы, сочетающие свойства бозонных и фермионных

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

где q — числовой параметр. Главное свойство операторов Q — нильпотентность — унаследовано от фермионных операторов f:

$$Q_+^2 = Q_-^2 = 0. \tag{15.3}$$

Мы построили операторы таким образом, чтобы действуя на состояния $|n_b, n_f\rangle$ с n_b бозонов и n_f фермионов, они не меняли полного числа частиц

$$\begin{aligned} Q_+|n_b, n_f\rangle &= q\sqrt{n_b}|n_b - 1, n_f + 1\rangle, \\ Q_-|n_b, n_f\rangle &= q\sqrt{n_b + 1}|n_b + 1, n_f - 1\rangle. \end{aligned}$$

Неудобство таких операторов заключается в их неэрмитовости.

Введем новые эрмитовы линейные комбинации

$$Q_1 = Q_+ + Q_-, \quad Q_2 = \frac{Q_+ - Q_-}{\mathrm{i}}, \tag{15.4}$$

которые назовем *суперзарядами*. Введем также оператор Гамильтона

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

Последнее равенство легко доказать, если воспользоваться определением суперзарядов (15.4) и нильпотентностью (15.3). Кратко соотношения для гамильтониана запишутся как

$$[Q_i, H] = 0, \quad \{Q_i, Q_j\} = 2H\delta_{ij}. \tag{15.5}$$

Набор соотношений для коммутаторов или антикоммутаторов называют алгеброй. Когда задана алгебра, можно забыть о том, откуда возникли соотношения (15.5), и доказать два свойства гамильтониана.

Свойства гамильтониана

Теорема 15.1. *Если выполнены соотношения (15.5), то оператор H имеет неотрицательный спектр.*

Действительно, пусть ψ_1 — собственная функция оператора Q_1 с собственным значением λ

$$Q_1\psi_1 = \lambda\psi_1,$$

тогда ψ_1 является в то же время собственной функцией H с собственным значением $E = \lambda^2$:

$$H\psi_1 = \lambda^2\psi_1.$$

Теорема 15.2. *Если выполнены соотношения (15.5), то все собственные значения гамильтониана H с $E \neq 0$ двукратно вырождены.*

Обозначим $\psi_2 = Q_2\psi_1$, тогда

$$Q_1\psi_2 = Q_1Q_2\psi_1 = -Q_2Q_1\psi_1 = -\lambda Q_2\psi_1 = -\lambda\psi_2.$$

То есть ψ_2 оказалась собственной функцией оператора Q_1 с собственным значением $-\lambda$. С другой стороны,

$$[H, Q_2] = 0 \Rightarrow H\psi_2 = HQ_2\psi_1 = Q_2H\psi_1 = Q_2\lambda^2\psi_1 = \lambda^2\psi_2.$$

Значит $\psi_2 \neq \psi_1$ также собственная функция H с тем же собственным значением λ^2. Только при $\lambda = 0$ двукратного вырождения нет, поскольку $\psi_2 = Q_2\psi_1 = 0$.

15.2 Суперсимметричный осциллятор

До сих пор мы рассматривали абстрактные операторы Q_i и H и выводили их общие свойства, а теперь попробуем их реализовать, т.е. явно выписать. Из свойства (15.1) можно увидеть, что операторы $b^{\pm}$ нельзя записать в виде конечных матриц. Поскольку след произведения двух матриц не зависит от порядка сомножителей, коммутатор конечных матриц не может быть равен единичной матрице. Поэтому попробуем реализовать бозонные операторы в виде дифференциальных операторов первого порядка, действующих на функциях бесконечномерного гильбертова пространства. В частности, годятся известные из квантовой механики операторы рождения и уничтожения одномерного линейного осциллятора

$$H_o = b^+b^- + \frac{1}{2} = -\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{dx^2} - x^2\right), \quad b^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mp ip + x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mp\frac{d}{dx} + x\right),$$

где мы положили $m = \hbar = \omega = 1$.

Фермионные операторы можно реализовать в виде матриц 2×2, проекторов на состояния $(1, 0)$ и $(0, 1)$

$$f^+ = \sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\sigma_1 + i\sigma_2}{2}, \quad f^- = \sigma^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\sigma_1 - i\sigma_2}{2}.$$

Теперь можно выписать суперзаряды и гамильтониан

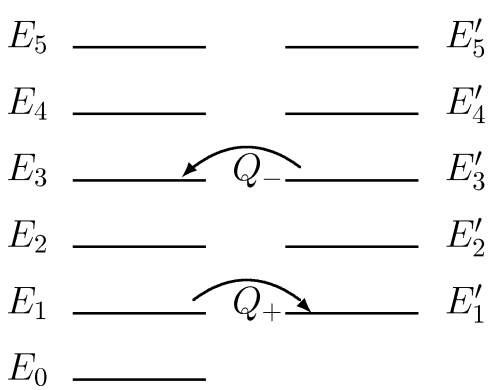
$$Q_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & \frac{d}{dx}+x \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad Q_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{d}{dx}+x & 0 \end{pmatrix},$$

$$H = -\begin{pmatrix} \frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{dx^2}-x^2-1\right) & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{dx^2}-x^2+1\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b^-b^+ & 0 \\ 0 & b^+b^- \end{pmatrix}. \qquad \textbf{(15.6)}$$

Собственные значения энергии можно найти, если предварительно упростить гамильтониан. Воспользуемся тем, что операторы b и f можно переставлять, а «неправильные» комбинации b^-b^+ или f^-f^+ можно свести к «правильным» b^+b^- или f^+f^-, если воспользоваться перестановочными соотношениями **(15.1),(15.2)**:

$$H = b^-f^+b^+f^- + b^+f^-b^-f^+ = \left(1+b^+b^-\right)f^+f^- + b^+b^-\left(1-f^+f^-\right) =$$
$$= b^+b^- + f^+f^- = \left(b^+b^- + \frac{1}{2}\right) + \left(f^+f^- - \frac{1}{2}\right).$$

Отсюда следует, что собственные числа $E = (n_b + 1/2) + (n_f - 1/2)$. «Половинки» $+1/2$ и $-1/2$ в первой и второй скобке взаимно компенсируются и получается $E = n_b + n_f$.



Для рассмотренной реализации, которая называется *суперсимметричным осциллятором*, H - диагональная матрица **(15.6)**, составленная из операторов

$$H = \begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix}, \qquad \textbf{(15.7)}$$

а ее собственные значения отличаются ровно на единицу $1 = b^-b^+ - b^+b^-$. Наименьшее собственное значение оператора

$$H_- = b^+b^- = -\frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{dx^2} - x^2\right) - \frac{1}{2}$$

равно нулю, а все остальные уровни E_N расположены на равных расстояниях. Спектр E'_N оператора $H_+ = b^-b^+$ расположен на единицу выше

$$b^+b^-\psi_n = E_n\psi_n,\ E_n = 0,1,2,\ldots, \quad b^-b^+\psi_n = E'_n\psi_n,\ E'_n = 1,2,3,\ldots.$$

Собственные функции, решение спектральной задачи

$$H\chi_N = \lambda_N^2\chi_N, \quad \chi_N = \begin{pmatrix} \psi'_N \\ \psi_N \end{pmatrix},$$

представляют собой столбец из двух функций $\psi'_N(x), \psi_N(x)$. Поскольку гамильтониан (15.7) диагонален, для каждого дифференциального оператора получается своя задача на собственные значения

$$H_+\psi'_N = E'_N\psi'_N, \quad H_-\psi_N = E_N\psi_N$$

с одинаковыми собственными значениями $E_N = E'_N = \lambda_N^2$, кроме нулевого уровня $N = 0$. Так и должно было получиться согласно общей теореме 15.2.

Таким образом, суперсимметричный осциллятор представляет собой два линейных осциллятора со смещенными на ступеньку друг относительно друга спектрами. Все его состояния, кроме основного, двукратно вырождены, как и должно быть по теореме 15.2. На рисунке показано, как под действием оператора Q_- происходит переход с системы уровней E'_i в систему $E_i, i = 1, 2, \ldots$, а под действием оператора Q_+ обратный переход. Только основное состояние E_0 никуда не переходит

$$Q_+\chi_0 = 0, \quad \chi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_0 \end{pmatrix},$$

откуда следует, что $b^-\psi_0 = 0$.

15.3 Уравнение Шредингера

Форминвариантность

Все выводы предыдущего раздела, кроме эквидистантного спектра, относятся и к общему случаю. Чтобы гамильтониан оставался квадратичным по импульсам, можно выбрать бозонные операторы более общего вида

$$b^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\mp \mathrm{i}p + W(x)\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\mp\frac{d}{dx} + W(x)\right],$$

где $W(x)$ — дифференцируемая функция. Рассмотренному простейшему примеру суперсимметричного осциллятора отвечает $W(x) = x$. Для гамильтониана и суперзарядов получаем

$$H = \begin{pmatrix} b^-b^+ & 0 \\ 0 & b^+b^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(p^2 + W^2 + \sigma_3 W'\right),$$
$$Q_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\sigma_2 p + \sigma_1 W), \quad Q_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_1 p + \sigma_2 W),$$

где $H_\pm = p^2/2 + U_\pm$, а потенциалы $U_\pm(x)$ выражаются через функцию $W(x)$:

$$U_\pm(x) = \frac{1}{2}\left[W^2(x) \pm W'(x)\right]. \tag{15.8}$$

Заметим, что в общем случае коммутатор $[b^+, b^-] = W'(x)$ может и не быть равным единице. Однако соотношения (15.5) выполняются, поэтому спектры операторов H_+ и H_- совпадают за исключением нижнего уровня оператора H_-. Можно построить волновую функцию, соответствующую нулевому невырожденному уровню, воспользовавшись соотношением $b^-\psi_0 = 0$:

$$\psi_0(x) = \exp\left(-\int^x W(x')\,dx'\right). \tag{15.9}$$

Чтобы собственные функции лежали в гильбертовом пространстве, они должны быть нормируемы, что накладывает дополнительные ограничения на выбор функции $W(x)$. Процедуру представления потенциала уравнения Шредингера в форме (15.8) удается выполнить аналитически лишь в нескольких частных случаях, потому что задача сводится к уравнению Рикатти, которое очень редко решается.

Тем не менее, если выполнено еще одно дополнительное условие, называемое *форминвариантностью*, можно построить спектр оператора H, не вычисляя производных и не решая дифференциальных уравнений. Нахождение спектра одномерного уравнения Шредингера для частицы в яме сводится к чисто алгебраической процедуре. Мы здесь рассмотрим только задачу построения спектра. Разумеется, в этом же случае можно построить явно и волновые функции уравнения Шредингера.

Определение 15.1. Потенциал называется *форминвариантным*, если U_- и U_+ отличаются друг от друга только параметрами $a = (a^{(1)}, a^{(2)}, \ldots, a^{(k)})$ и аддитивной добавкой

$$U_+(a, x) = U_-(a_1, x) + R(a_1), \quad a_1 = f(a), \tag{15.10}$$

где $R(a_1)$ — добавка, а $a_1 = (a_1^{(1)}, a_1^{(2)}, \ldots, a_1^{(k)})$ совокупность «новых» параметров, которые получаются из «старых» с помощью отображения f.

Построение спектра

Рассмотрим спектральную задачу для одномерного уравнения Шредингера (частица в яме)

$$H\psi_N = E_N\psi_N, \quad H = \frac{p^2}{2} + U(a, x),$$

где H — уже не матрица, а дифференциальный оператор второго порядка, а потенциал зависит от координаты x и параметра a. Пусть потенциал U отличается от U_- на аддитивную добавку $U(a, x) = U_-(a, x) + c(a)$ где $c(a)$ разница между потенциалом U и потенциалом U_-, удовлетворяющим условию (15.10). Для этого рассмотрим серию вспомогательных гамильтонианов, которые получаются из

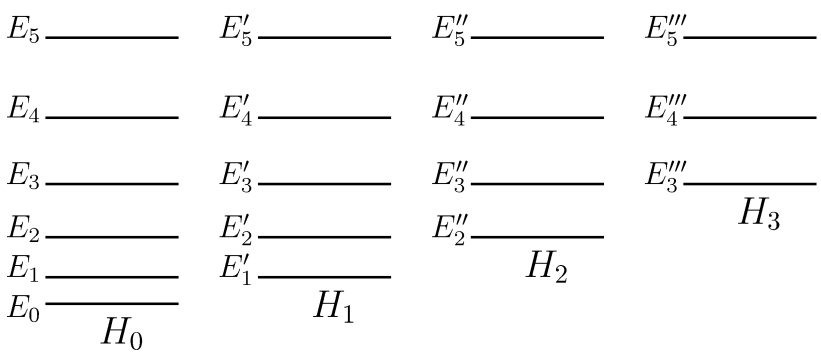


Рис. 15.1: Схема уровней гамильтонианов H_i.

$H_0 \equiv H_- = p^2/2 + U_-$ последовательным применением функционального равенства **(15.10)**:

$$
\begin{aligned}
&H_0 = \frac{p^2}{2} + U_-(a, x), \\
&H_1 = \frac{p^2}{2} + U_+(a, x) = \frac{p^2}{2} + U_-(a_1, x) + R(a_1), && a_1 = f(a) \\
&H_2 = \frac{p^2}{2} + U_+(a_1, x) + R(a_1) = \frac{p^2}{2} + U_-(a_2, x) + R(a_1) + R(a_2), && a_2 = f(a_1) \\
&\dots && \dots \\
&H_N = \frac{p^2}{2} + U_-(a_N, x) + R(a_1) + R(a_2) + \dots + R(a_N), && a_N = f(a_{N-1}).
\end{aligned}
$$

Диаграмма уровней вспомогательных гамильтонианов показана на рис. 15.1. В общем случае спектры не эквидистантные. Тем не менее, для каждой пары соседних вспомогательных гамильтонианов выполняется теорема 15.2. Поэтому спектры операторов H_i, H_{i+1}, стоящих в соседних строчках формулы (или в соседних колонках рисунка 15.1), совпадают за исключением нижнего уровня оператора H_i. Значит энергия уровня N есть просто сумма функций $R(a_i)$

$$E_N = c(a) + \sum_{i=1}^{N} R(a_i), \quad a_{i+1} = f(a_i). \tag{15.11}$$

15.4 Примеры

Пример 15.1 *(Линейный осциллятор).* Потенциал линейного осциллятора $U = x^2/2$. Выберем функцию $W(x) = x$, тогда $U_-(x) = (W^2 - W')/2 = (x^2 - 1)/2$, значит $c = U(x) - U_-(x) = 1/2$. Потенциал $U_+ = (W^2 + W')/2 = U_-(x) + 1$, поэтому функция

$R = 1$, а f — тождественное отображение. Спектр осциллятора сразу получается из общего выражения (15.11)

$$E_N = c + \sum_{i=1}^{N} R = \frac{1}{2} + N.$$

Уровни, как и должно быть, получились эквидистантными.

Пример 15.2 *(Потенциал Пешля—Теллера).* При разделении переменных в задаче о движении частицы в центрально-симметричном поле возникает угловое уравнение

$$\frac{d^2\psi}{d\theta^2} + \operatorname{ctg}\theta \frac{d\psi}{d\theta} - \frac{m^2\psi}{\sin^2\theta} = -\lambda\psi,$$

где m — азимутальное квантовое число, θ — угол в сферических координатах. Приведем уравнение к каноническому виду преобразованием Лиувилля

$$\psi = u(\theta)/\sqrt{\sin\theta}$$

и получим уравнение Шредингера

$$u'' + \left(\frac{1}{4} - \frac{m^2 - \frac{1}{4}}{\sin^2\theta}\right) u = \lambda u$$

с потенциалом Пешля—Теллера [37]

$$U(\theta) = -\frac{1}{8} + \frac{m^2 - \frac{1}{4}}{2\sin^2\theta}, \quad E = \frac{\lambda}{2}.$$

Выберем $W(a, \theta) = a \operatorname{ctg}\theta$, получится

$$U_-(a, \theta) = \frac{1}{2}\left(W^2 - W'\right) = \frac{a(a+1)}{2\sin^2\theta} - \frac{a^2}{2}.$$

Чтобы получить потенциал $U(x)$, надо выбрать $a = -|m| - 1/2, c(a) = |m|(|m|+1)/2$. Второй корень квадратного уравнения $a(a+1) = m^2 - 1/4$ не подходит, потому что дает волновую функцию основного состояния (15.9) $\psi \propto (\sin\theta)^{-a-1/2}$, имеющую сингулярность при $\theta \to 0, \pi$. «Верхний» потенциал переходит в «нижний» с уменьшенным на единицу параметром a, $f(a) = a - 1$,

$$U_+(a, \theta) = \frac{1}{2}\left(W^2 + W'\right) = \frac{a(a-1)}{2\sin^2\theta} - \frac{a^2}{2} = U_-(a-1, \theta) - \frac{a^2}{2} + \frac{(a-1)^2}{2}.$$

Найденная форминвариантность позволяет записать спектр

$$E_N = -\frac{1}{8} + \frac{(-|m| - 1/2 - N)^2}{2} = \frac{(N + |m|)(N + |m| + 1)}{2} \Rightarrow \lambda_l = l(l+1).$$

Здесь $N = 0, 1, 2, \ldots$, а $l = |m|, |m| + 1, |m| + 2, \ldots$ — орбитальное квантовое число.

Пример 15.3 *(Кулоновский потенциал).* Радиальное уравнение Шредингера для задачи Кеплера решается с потенциалом

$$U(r) = -\frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{2r^2}, \tag{15.12}$$

где $l = 0, 1, 2, \ldots$ — орбитальное квантовое число, а второе слагаемое, центробежная энергия, возникает при разделении переменных в сферических координатах. Выберем $W(a, b, r) = a/r + b$, тогда

$$U_-(a, b, r) = \frac{1}{2}\left(\frac{a(a+1)}{r^2} + \frac{2ab}{r} + b^2\right). \tag{15.13}$$

Чтобы коэффициенты при степенях r совпадали в формулах (15.12) и (15.13), надо выбрать $a = -l - 1, b = -1/a, c(a, b) = -b^2/2$. Второй корень $a = l$ квадратного уравнения не годится, потому что волновая функция основного состояния (15.9) $\psi \propto r^{-a}\mathrm{e}^{-br}$ имела бы тогда особенности при $r \to 0, \infty$.

Найдем «верхний» потенциал

$$U_+(a, b, r) = \frac{1}{2}\left(\frac{a(a-1)}{r^2} + \frac{2ab}{r} + b^2\right) = U_-(a_1, b_1, r) + R(a_1, b_1).$$

Для выполнения требования форминвариантности следует взять $a_1 = f(a) = a - 1, b_1 = -1/a_1$, тогда

$$R(a_1, b_1) = \frac{b^2}{2} - \frac{b_1^2}{2} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{a^2} - \frac{1}{a_1^2}\right).$$

Теперь можно сразу выписать собственные значения энергии

$$E_N = -\frac{1}{2a^2} + \left(\frac{1}{2a^2} - \frac{1}{2a_1^2}\right) + \left(\frac{1}{2a_1^2} - \frac{1}{2a_2^2}\right) + \cdots + \left(\frac{1}{2a_{N-1}^2} - \frac{1}{2a_N^2}\right) = -\frac{1}{2a_N^2}.$$

Подставляя $a = -l - 1$, получаем формулу Бальмера $E_N = -1/2(N + l + 1)^2 = -1/2n^2$, $N = 0, 1, 2, \ldots$ — радиальное квантовое число; $n = l+1, l+2, \ldots$ — главное квантовое число.

Замечание 15.1. Рассмотренные нами примеры применения форминвариантности для нахождения спектра тесно связаны с системами ортогональных полиномов. Первый пример, осциллятор, имеет волновые функции в виде произведения гауссовой функции на полиномы Эрмита. Во втором примере получатся полиномы Лежандра. Третий пример связан с полиномами Лагерра, через которые выражаются радиальные волновые функции атома водорода [3].

Упражнение 15.1. Постройте подходящую функцию $W(x)$ для модифицированного уравнения Пешля — Теллера с потенциалом $U(x) = -a(a+1)/\mathrm{ch}^2 x, a > 0$ и постройте спектр. Убедитесь, что в такой яме имеется лишь конечное число связанных состояний и найдите это число.

Упражнение 15.2. Для пространственного осциллятора

$$U(x) = \frac{r^2}{2} + \frac{l(l+1)}{2r^2}$$

подберите функцию вида $W = a\,r + b\,r^{-1}$ и постройте спектр. Какова его кратность вырождения?