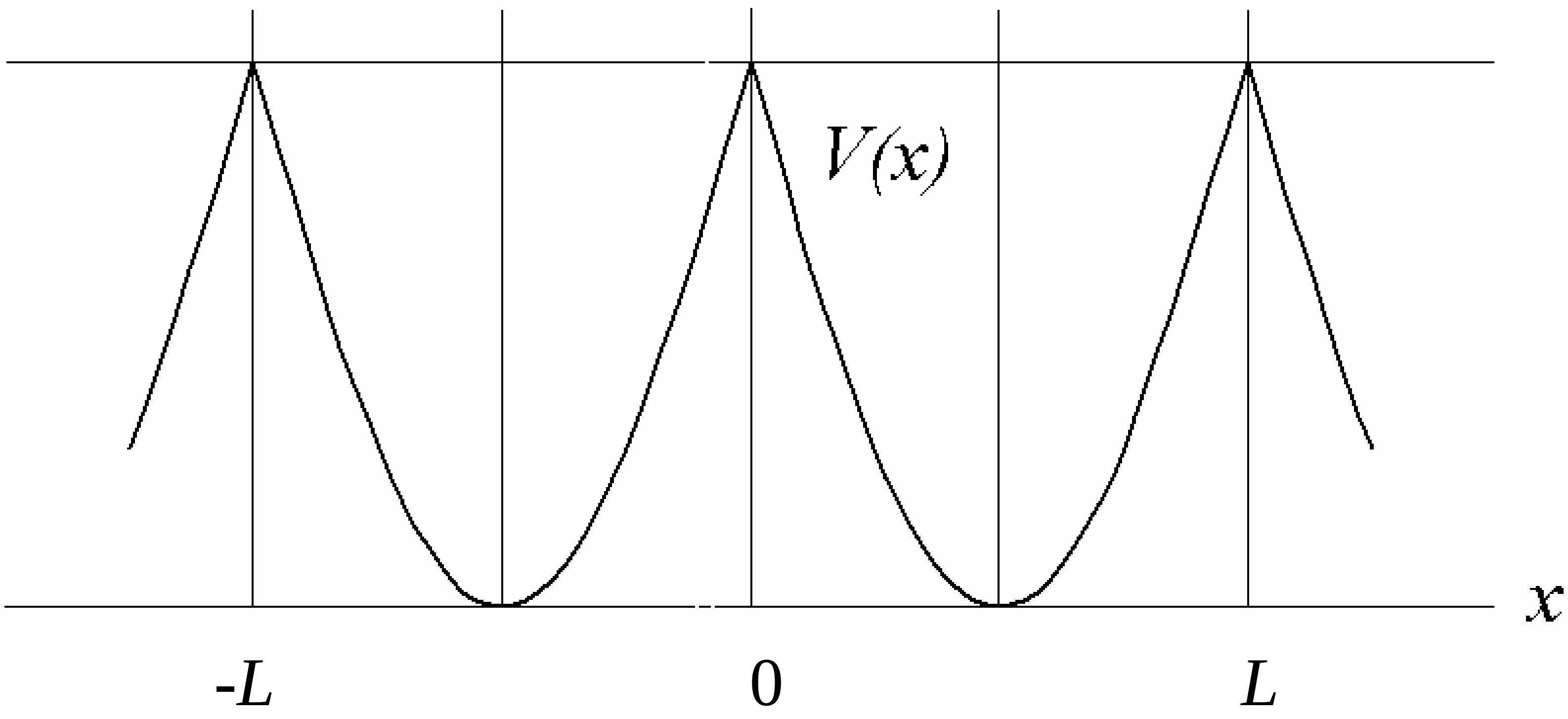
Трансляционная симметрия и ее применения

Всем хороша классическая механика, но симметрия задачи в ней видна плохо…

Сменим декорации: рассмотрим уравнение Шредингера для одномерной частицы в периодическом потенциале $V(x)$: $V(x+L)=V(x)$:



$$\hat{H}\,\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\,\psi(x)$$ Eq.(1)

Введем *оператор трансляции (сдвига)* на L: $\hat{T}_L\,\psi(x) = \psi(x-L)$

- **Утверждение:** $\hat{T}_L\,\hat{H} = \hat{H}\,\hat{T}_L$ *– коммутируют.*

- **Доказательство:**

$$\left(\hat{T}_L\,\hat{H}\right)\psi(x) = \hat{T}_L\left(\hat{H}\,\psi\right)(x) = \left(\hat{H}\,\psi\right)(x-L) =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x-L) + V(x-L)\psi(x-L) =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x-L) + V(x)\psi(x-L) =$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x-L) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\left(\hat{T}_L\,\psi\right)(x) =$$

$$\hat{H}\left(\hat{T}_L\,\psi\right)(x) = \left(\hat{H}\,\hat{T}_L\right)\psi(x), \quad \forall\,\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \hat{T}_L\,\hat{H} = \hat{H}\,\hat{T}_L$$

Следствие 1: Если $\psi(x)$ – решение Eq.(1), то и $\psi(x-L)$ – тоже решение.

Следствие 2: У операторов $\hat{H}$ и $\hat{T}_L$ можно выбрать общие с.ф.:

$$\hat{T}_L\,\psi(x)=\lambda\psi(x)\,;\quad \hat{H}\,\psi(x)=E\,\psi(x)$$

Замечание: то же верно и для сдвигов $\hat{T}_{nL}\,\psi(x)=\psi(x-nL),\quad n\in\mathbb{Z}$

Собственные функции оператора трансляции

$$\hat{T}_L\,\psi(x)=\psi(x-L)=\psi(x)-\psi'(x)\cdot L+\frac{1}{2}\psi''(x)\cdot L^2+\ldots=$$

$$\left[\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\cdot\left(-L\cdot\frac{d}{dx}\right)^n\right]\psi(x)=\exp\left[-L\cdot\frac{d}{dx}\right]\psi(x)=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}L\cdot\hat{p}\right]\psi(x)$$

Т.е. *формально* $\hat{T}_L=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}L\cdot\hat{p}\right]$, где $\hat{p}=-i\hbar\frac{d}{dx}$ – оператор импульса.

Напомним, что собственные функции и собственные значения $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ суть $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx)$ и $p = \hbar k$, где $k \in \mathbb{R}$ – волновое число.

По определению функции от оператора,

$$\hat{A}\psi_a(x) = a\,\psi_a(x) \quad \overset{\text{def}}{\longleftrightarrow} \quad f\left(\hat{A}\right)\psi_a(x) = f(a)\,\psi_a(x)$$

запись $\hat{T}_L = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} L \cdot \hat{p}\right]$ означает, что *оператор* $\hat{T}_L$ *имеет те же собственные функции* $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx)$*, что и* $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$, *а его собственные значения суть* $\lambda = \exp(-ikL)$*,* $k \in \mathbb{R}$*.*

В самом деле, непосредственно из определения $\hat{T}_L$ следует, что:

$$\hat{T}_L \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx) \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\big(ik(x-L)\big) = \exp(-ikL) \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx) \right\}$$

Замечание: На первый взгляд, формула $\hat{T}_L = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} L \cdot \hat{p} \right]$ задает

действие оператора сдвига только на его собственные функции.

Но эти функции образуют базис в следующем смысле: для $\forall f(x)$:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\psi_k(x)\,dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\exp(ikx)\,dk$$ (*интеграл Фурье*) $\Rightarrow$

$$\hat{T}_L\, f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\left(\hat{T}_L\, \psi_k\right)(x)\,dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\exp\big(ik(x-L)\big)\,dk \equiv f(x-L)$$

Получаем обычное действие оператора сдвига на произвольную функцию.

• **Утверждение:** пускай $u(x)$ – периодическая функция с периодом L.

Тогда для любых трансляций вида $x \to x + n\,L, \quad n \in \mathbb{Z}$,

функции $\varphi_k(x) = u(x)\exp(ikx)$ – собственные для операторов $\hat{T}_{nL}$.

• **Доказательство:**

$$\hat{T}_{nL}\,\varphi_k(x) = u(x-nL)\exp\big(ik(x-nL)\big) = u(x)\exp\big(ik(x-nL)\big) = e^{-iknL}\,\varphi_k(x)$$

• **Теорема Блоха** (*F. Bloch*, 1928):

Собственные функции $\hat{H}$ *с потенциалом* $V(x+L) = V(x)$ *можно искать*

в виде $\varphi_k(x) = u_k(x)\exp(ikx)$, где $u_k(x+L) = u_k(x)$ (*функции Блоха*).

• **Доказательство:** в силу коммутации $\hat{T}_{nL}\,\hat{H} = \hat{H}\,\hat{T}_{nL}$, собственные

функции $\hat{H}$ можно выбрать общими для $\hat{H}$ и $\hat{T}_{nL}$.

Групповые свойства трансляций

Рассмотрим трансляцию на число a как оператор в $\mathbb{R}^1$: $\quad \mathbb{t}_a\, x = x + a$

Умножение трансляций: $\left(\mathbb{t}_a \cdot \mathbb{t}_b\right) x = \left(x + b\right) + a = x + a + b = \mathbb{t}_{a+b}\, x$

Очевидно, оно коммутативно, т.е. $\left(\mathbb{t}_a \cdot \mathbb{t}_b\right) x = \left(\mathbb{t}_b \cdot \mathbb{t}_a\right) x$, и ассоциативно:

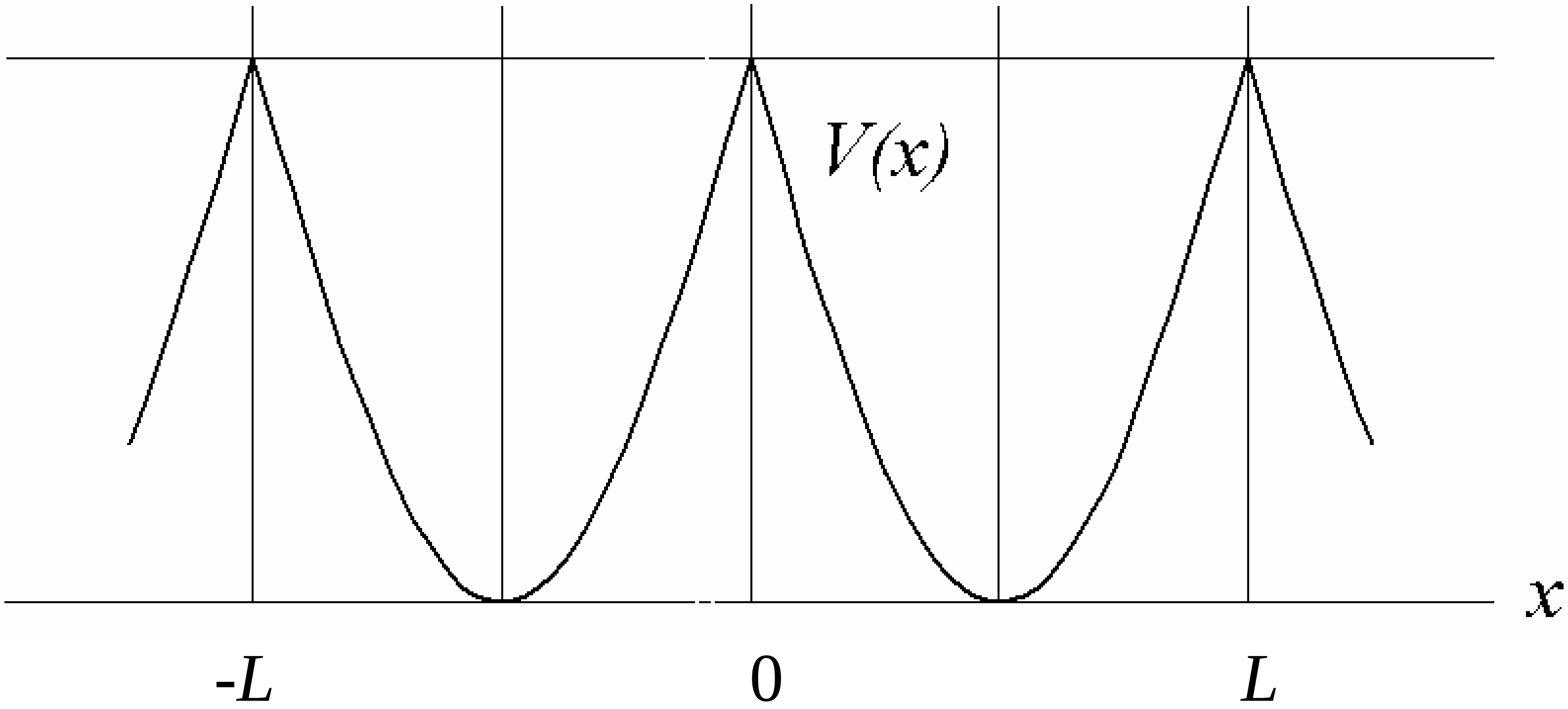
$$\left(\mathbb{t}_a \cdot \left(\mathbb{t}_b \cdot \mathbb{t}_c\right)\right) x = \left(x + b + c\right) + a = \left(x + c\right) + a + b = \left(\left(\mathbb{t}_a \cdot \mathbb{t}_b\right) \cdot \mathbb{t}_c\right) x$$

Тождественная трансляция: $\quad \mathbb{t}_0\, x = x + 0 = x$

Обратная трансляция $\mathbb{t}_a^{-1}\, x = \mathbb{t}_{-a}\, x = x - a$

$\Rightarrow$ Трансляции в $\mathbb{R}^1$ образуют *коммутативную (абелеву) группу*.

Она изоморфна группе вещественных чисел $\mathbb{R}$ (с операцией сложения), и может быть с ней отождествлена.



В связи с задачей об одномерной частице в периодическом потенциале $V(x)$: $V(x+L)=V(x)$ для нас представляет интерес лишь дискретное подмножество трансляций вида: $\mathfrak{t}_{nL}\ x = x + nL, \quad n \in \mathbb{Z}$.

Очевидно, они тоже образуют группу (*трансляционную группу решетки*), изоморфную группе целых чисел $\mathbb{Z}$. Она является *подгруппой* $\mathbb{R}$.

Выше мы ввели *операторы трансляции* на nL: $\hat{T}_{nL}\,\psi(x)=\psi(x-nL)$

Покажем, что совокупность $\left\{\hat{T}_{nL}\right\}_{n\in\mathbb{Z}}$ тоже образует коммутативную группу:

$$\left(\hat{T}_{nL}\cdot\hat{T}_{mL}\right)\psi(x)=\hat{T}_{nL}\cdot\left(\hat{T}_{mL}\,\psi\right)(x)=\psi\left(x-(m+n)L\right)=$$

$$\hat{T}_{mL}\cdot\left(\hat{T}_{nL}\,\psi\right)(x)=\left(\hat{T}_{mL}\cdot\hat{T}_{nL}\right)\psi(x)$$

Ассоциативность умножения проверяется непосредственно, единичная операция $\hat{T}_0\,\psi(x)=\psi(x-0\cdot L)\equiv\psi(x)$, обратная $\hat{T}_{-nL}\,\psi(x)=\psi(x+nL)$.

Отметим следующую взаимосвязь операций трансляции $\mathbb{t}_{nL}$ и $\hat{T}_{nL}$:

$$\hat{T}_{nL}\,\psi(x)=\psi(x-nL)=\psi\left(\mathbb{t}_{nL}^{-1}\,x\right),\quad \forall n\in\mathbb{Z}$$

$\left\{\hat{T}_{nL}\right\}_{n\in\mathbb{Z}}$ – *представление группы* $\left\{\mathbb{t}_{nL}\right\}_{n\in\mathbb{Z}}$ (*точное, т.е. изоморфное*)

Неприводимые представления трансляций одномерной решетки

Выше мы показали, что для любых трансляций вида $\mathfrak{t}_{nL}\ x = x + nL, \quad n \in \mathbb{Z}$, собственные функции операторов $\hat{T}_{nL}$ имеют вид $\varphi_k(x) = u(x)\exp(ikx)$, где $u(x)$ – периодическая функция с периодом L:

$$\hat{T}_{nL}\ \varphi_k(x) = u(x - nL)\exp\big(ik(x - nL)\big) = u(x)\exp\big(ik(x - nL)\big) = e^{-iknL}\ \varphi_k(x)$$

Говорят, что функция $\varphi_k(x) = u(x)\exp(ikx)$ образует *базис одномерного (неприводимого) представления* Γ_k группы трансляции решетки:

$$\mathfrak{t}_{nL}\ x = x + nL \quad \mapsto \quad \chi_k(n) = \exp(-iknL), \quad n \in \mathbb{Z}, \quad k \in \mathbb{R}$$

Числа $\chi_k(n)$ называются *характерами этого представления*.

- Таким образом, волновое число $k \in \mathbb{R}$ приобретает важный теоретико-групповой смысл – оно обозначает неприводимые представления группы трансляций решетки.