Теоретическая физика, астрофизика и космология ISSN 1991-3117; ISSN 1991-3907 (эл.)
Том **6**, N 1, с. 1 – 13, в1, 28 мая 2011

Электрон.: ТФАК: 3800-020 в2, 28 сентября 2012 DOI: 10.9751/TFAK.3800-020

Модели мягких ротаторов и теория гармонического ротатора

Захид Закир [1]

Аннотация

Состояния кругового осциллятора разделены на колебательную моду, содержащую нулевую энергию и вращательную моду, у которой нулевой энергии нет, но есть сохраняющийся угловой момент. На основе анализа свойств моделей жёстких и полужёстких ротаторов формулируется теория мягких ротаторов, когда притяжение уравновешено только центробежной силой. Как примеры рассмотрены кулоновский ротатор (модель Бора) и магнито-гармонический ротатор (уровни Фока-Ландау). Исчезновение радиальных скоростей в модели магнито-гармонического ротатора взято как определяющее свойство нового класса движений в гармоническом потенциале. Исключение энергий магнитного и спинового расщеплений, специфических для магнитного поля, ведёт к простой и общей модели плоского гармонического ротатора (кругового осциллятора без радиальной скорости), где кинетическая энергия сводится к чисто вращательной энергии. Частоты всех уровней гармонического ротатора одинаковы, спектр энергий эквидистантен и уровни двукратно вырождены. В основном состоянии нет нулевой энергии от вращательных мод, а нулевая энергия колебательных мод может быть компенсирована спиновыми эффектами или симметриями системы. В этом случае операторы наблюдаемых зануляют наблюдаемые основного состояния, т.е. нормально-упорядочены в «сильном» смысле. В цепочке гармонических ротаторов коллективные вращения вокруг общей оси ведут к поперечным волнам, квантование которых ведёт к квазичастицам и дыркам, переносящим угловой момент. Группой симметрии ротатора в цепочке становится SU(2).

PACS: 03.65.Ge, 11.30.Er, 1130.Ly, 11.90.+t

Ключевые слова: квантование, нулевая энергия, колебания, вращения, дискретные симметрии

Содержание

Введение

При квантовании малых *колебаний* систем они, как правило, сводятся к набору гармонических осцилляторов с эквидистантным спектром энергий и с нулевой энергией. По чисто формальной аналогии осцилляторное квантование применялось для всех

[1] *Центр теоретической физики и астрофизики*, *Ташкент*, *Узбекистан*, zahidzakir@theor-phys.org

периодических процессов в системах с гармоническими потенциалами. Однако, физический смысл частоты не менее часто связан и со вторым типом периодичности - *вращениями*. К ним также формально применялось осцилляторное квантование, полагая, что принципиально нового не возникает.

В действительности же в системах с вращательными модами имеются нетривиальные ограничения, связанные с их симметриями. Первое ограничение хорошо известно и связано с сохранением углового момента M. Второе ограничение возникает из двукратного вырождения уровней и связанной с этим новой дискретной симметрии, которая уже не так широко известна.

В стандартных курсах квантовой механики ротаторы обычно ассоциируются с *жёстким* ротатором фиксированной длины, что соответствует наложению связи $\varphi = r^2 - a^2 \approx 0$, а также с *полужёстким* ротатором, два конца которого совершают колебания с потенциалом $V = \kappa(r-a)^2$, мало отклоняясь от фиксированной длины (κ - коэффициент упругости). В них есть равновесный радиус a даже в отсутствие вращения, энергии растут как n^2 и связаны с ростом частоты. Эти модели хорошо описывают вращательные уровни молекул и ядер.

В данной статье будет рассмотрен другой класс ротаторов, когда на плоскости вращения силы притяжения уравновешены *только* центробежной силой. Их далее будем называть *мягкими ротаторами*. К ним, в частности, относятся хорошо известные модели вращений заряда в кулоновском поле (*кулоновский* ротатор) и в постоянном магнитном поле (*магнито-гармонический* ротатор). В квантовой теории эти модели описывают вращательные уровни атомов (модель Бора [1]) и дискретный спектр энергий заряда в магнитном поле (уровни Фока-Ландау [2,3]).

В статье формулируется общий метод квантования мягких ротаторов и более детально рассмотрена модель *гармонического ротатора* с потенциалом упругих сил на плоскости вращения. Лагранжиан последней модели включает гармонический потенциал и чисто вращательный кинетический член, что соответствует наложению связи $\varphi = |p_r| \approx 0$ в общий гамильтониан, исключающей радиальный импульс p_r.

Частоты всех уровней гармонического ротатора постоянны и одинаковы, спектр энергий эквидистантен и в основном состоянии нет нулевой энергии от вращательных мод. При компенсации нулевой энергии колебательных мод спиновыми эффектами или симметриями системы операторы наблюдаемых зануляют наблюдаемые основного состояния, т.е. нормально-упорядочены в «сильном» смысле.

В цепочке гармонических ротаторов коллективные вращения вокруг общей оси приводят к поперечным волнам, которые и квантуются, приводя к квазичастицам и дыркам, переносящим угловой момент. Группой симметрии при этом становится не $O(2)$, как у изолированного ротатора, а группа $SU(2)$. Это связано с тем, что цепочка ротаторов переходит в себя не при повороте отдельного ротатора на 2π, а при его повороте на 4π, когда удаётся распутать цепочку без изменения границ (метод Дирака). В результате, в цепочке естественно возникают кванты в спинорном представлении группы вращений.

При включении взаимодействий квантов гармонического ротатора по теории возмущений операторы в гамильтонианах и токах естественным образом «сильно» нормально упорядочены. Такое упорядочение можно рассматривать как часть рецепта перехода от осцилляторного к вращательному квантованию.

В разделе 1 статьи обсуждены стандартные модели ротаторов, а в разделе 2 построена теория гармонического ротатора и цепочек гармонических ротаторов.

1. Применяемые на практике модели ротаторов

1.1. Жёсткий ротатор

Две частицы, закреплённые на концах жёсткого стержня длины $r = a$ и вращающиеся вокруг центра инерции с частотой ω, образуют *жёсткий ротатор*. Стандартный физический пример жёсткого ротатора – двухатомная молекула, где разница энергий колебательных уровней намного больше разницы вращательных уровней. Вращательные уровни поэтому располагаются между колебательными, когда молекулу в первом приближении можно рассматривать как жёсткую систему.

Волновое уравнение системы из двух частиц с приведённой массой m

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2\psi - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + E\psi = 0. \qquad (1)$$

в приближении $r \approx a$, когда доминирует вращательная энергия, сводится к

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}. \qquad (2)$$

Угловой момент и гамильтониан жёсткого ротатора имеют вид:

$$M = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\theta},\;\; H = \frac{M^2}{2ma^2}, \qquad (3)$$

а угловая переменная θ есть циклическая переменная, так что соответствующий ей обобщённый импульс – угловой момент – сохраняется:

$$M = mr^2\dot{\theta} = mr^2\omega = const. \qquad (4)$$

Решения волнового уравнения ψ_n на плоскости вращения содержат частоты обоих направлений вращения ω_n:

$$\psi_n(\theta,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left[\left(iE_n t + iM_n\theta\right)/\hbar\right], \qquad (5)$$

$$\begin{aligned} &E_n = M_n\omega_n = n\hbar\cdot\omega_n\,, \\ &M_n = n\hbar, \quad n = 0, \pm1, ... \\ &\omega_n = n\omega',\;\; \omega' = \hbar/2ma^2. \end{aligned} \qquad (6)$$

Таким образом, как угловой момент, так и частота вращения жёсткого ротатора растут пропорционально n. В результате энергия уровня растёт как n^2, так что спектр энергий аналогичен спектру частицы в прямоугольной яме.

Но в яме есть нижший уровень $n = 1$ с ненулевой энергией, что требуется соотношениями неопределённостей, тогда как спектр жёсткого ротатора (6) начинается с $n = 0$ с энергией $E_n = 0$. Этот парадокс в виде явного противоречия соотношениям неопределённостей разрешается, если вернуться к исходному волновому уравнению (1) для системы в целом и учесть, что *приближение жёсткого ротатора* $r \approx a$ *не применимо именно к состоянию* $n = 0$. В этом состоянии вращательный вклад с $1/r^2$ исчезает из-за зануления углового момента и пренебрегать радиальным кинетическим членом нельзя. Поэтому уравнение (1) переходит не в (2), а в:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2\psi_0 + E_0\psi_0 = 0 \qquad (7)$$

и решения этого уравнения содержат вклад радиальных (*колебательных*) флуктуаций с $\delta E_0 > 0$ в соответствии с соотношениями неопределённостей. Это уточнение спектра ротаторов в отсутствие вращения необходимо учесть во всех типах ротаторов, в которых радиальные моды не запрещены симметриями системы.

Двукратное вырождение вращательных уровней порождает дискретную симметрию с новой сохраняющейся величиной – киральным зарядом Q, равным проекции углового момента на нормаль к плоскости вращения $\mathbf{n}_z$:

$$Q_n = \mathbf{n}_z \cdot \mathbf{M}_n. \qquad (8)$$

Знак углового момента, согласно (4), определяется знаком частоты вращения, тогда как знак Q зависит и от знака ориентации относительно нормали.

Физический смысл Q становится ясным, если рассмотреть *ротаторы, которые эволюционируют обратно во времени*, что формально допустимо из-за симметрии относительно обращения времени. При этом вращение в положительном направлении изменяется на обратную, направление углового момента и киральный заряд остаются прежними и положительными. Но, так как при этом частота изменяет знак, то согласно (6) меняется и знак энергии. Эти состояния *отрицательной энергии, идущие обратно во времени* интерпретируются как *зарядово-сопряжённые состояния с положительной энергией и частотой, идущие вперёд во времени* (*кроссинг-симметрия*).

Итак, свойства спектра энергий жёсткого ротатора, общие и для других видов ротаторов, состоят в том, что:

1) состояния *двукратно вырождены* для двух направлений вращения;

2) энергии пропорциональны угловому моменту и частоте: $E_n = M_n\omega_n$

3) в основном состоянии $n = 0$ *нет нулевой энергии* и *нулевого момента*;

4) в первом нетривиальном состоянии $n = \pm 1$ импульс $p \sim \hbar / a$;

5) есть киральная симметрия состояний идущих вперёд или назад во времени, соответствующий киральный заряд $Q = \mathbf{n}_z\mathbf{M}$ сохраняется;

6) уровни энергии (формально) симметричны относительно нуля $E_0 = 0$.

1.2. Полужёсткий осциллирующий ротатор

На примере двухатомной молекулы, как примера реальной физической системы, отклонения от идеализированного понятия жёсткого ротатора проявляются в том, что когда нет вращательной моды, тем не менее имеются нулевые осцилляции атомов около положения равновесия на низшем колебательном уровне. Поэтому для полноты описания необходимо учесть также и колебательные степени свободы системы.

Пусть вместо жёсткого закрепления на концах стержня обе частицы совершают малые колебания около положений равновесия $r = a \pm \delta r$. Малые колебания можно описывать потенциалом гармонического осциллятора $\kappa(r-a)^2/2$, где κ -коэффициент упругости и приходим к модели *полужёсткого осциллирующего ротатора*. В гамильтониане вращательный кинетический член ведёт себя как потенциал и его можно рассматривать как часть эффективной потенциальной энергии U_{eff} :

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + U_{eff}(r)$$
$$U_{eff}(r) = \frac{M^2}{2mr^2} + \frac{\kappa}{2}(r-a)^2. \quad (9)$$

Положение равновесия соответствует минимуму полной энергии, что определяется теперь не прежней точкой $r \approx a$, а минимумом потенциала $U_{eff}(r_0)$, наступающем в точке равновесия упругой и центробежной сил:

$$\frac{M^2}{mr_0^3} = \kappa|r_0 - a|. \quad (10)$$

В первом приближении можно пренебречь взаимным влиянием колебаний и вращений и тогда уровни энергии сводятся к сумме вращательных и колебательных энергий с двумя видами частот:

$$E_n = n_\theta \hbar \cdot \omega_{n_\theta} + \left(n_r + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$$
$$\omega_{n_\theta} = \frac{n_\theta \hbar}{2ma^2}, \quad \omega_0 = \sqrt{\kappa / m}. \quad (11)$$

Поправки к (11) можно найти разложив вращательный член в (9) по малым отклонениям от a.

Модель полужёсткого осциллирующего ротатора в первом приближении хорошо описывает колебательные и вращательные моды двухатомных молекул и некоторых несимметричных ядер.

Новым по сравнению с жёстким ротатором и принципиально важным свойством данной системы является условие равновесия центробежной и упругой сил (10). В случае мягких ротаторов это условие приобретает особое значение, что хорошо известно уже на примере кулоновского ротатора, к рассмотрению которого и переходим.

1.3. Кулоновский ротатор (модель Бора)

Первым, наиболее известным и успешным применением *мягкого* ротатора в квантовой теории был *кулоновкий ротатор*, где центробежная сила уравновешена кулоновским притяжением. Этот вид ротатора был использован в модели Бора для водородоподобных атомов [1]. В этой модели будем интересоваться теми её свойствами, которые окажутся полезными при рассмотрении гармонического ротатора.

Гамильтониан модели в общем случае имеет вид:

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{M^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}, \quad (12)$$

а уравнения движения для радиальной переменной есть:

$$m\dot{r} = p_r, \quad \dot{p}_r = \frac{\partial H}{\partial r} = -\frac{M^2}{mr^3} + \frac{Ze^2}{r^2}. \quad (13)$$

Эффективная потенциальная энергия

$$U_{eff}(r) = \frac{M^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r} \quad (14)$$

и полная энергия имеют минимумы при равновесии центробежной и кулоновской сил:

$$\frac{M_n^2}{mr_n^3} - \frac{Ze^2}{r_n^2} = 0. \tag{15}$$

Это условие даёт равновесный радиус и выражение для энергии орбит с чисто вращательным кинетическим членом:

$$r_n = \frac{M_n^2}{mZe^2}, \quad E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2M_n^2}, \tag{16}$$

что и соответствует уровням кулоновского ротатора. Затем квантование углового момента для этих уровней на плоскости вращения даёт уровни энергии с «магнитным» квантовым числом n_φ:

$$M_n = n\hbar = \left(n_\varphi + 1\right)\hbar, \quad n_\varphi = 0, \pm 1, \ldots \tag{17}$$

$$E_n = -M_n\omega_n = -n\hbar\omega_n, \quad \omega_n = \frac{mZ^2e^4}{2\hbar^3 n^3}. \tag{18}$$

Сдвиг на единицу в (17) связан с радиальными флуктуациями при отсутствии вращения, как это отмечалось в случае жёсткого ротатора. Уровни (18) совпадают с результатами решения уравнения Шредингера, когда $n_r = 0$, а азимутальное квантовое число равно «магнитному» квантовому числу $l = n_\varphi$, так что главное квантовое число есть $n = l + 1 = n_\varphi + 1$. Как видим, с ростом n частоты вращений уровней кулоновского ротатора уменьшаются как n^{-3}, а энергии как n^{-2}.

При переходах между чисто вращательными уровнями частоты излучаемых фотонов, таким образом, равны:

$$\Delta E_{nn'} = \hbar\omega_{nn'} = \hbar\left(n'\omega_{n'} - n\omega_n\right) = \frac{mZ^2e^4}{2\hbar^3}\left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right). \tag{19}$$

Как видим, частоты фотонов определяются не только разностью частот вращения электронов на двух уровнях, но и разностью угловых моментов на этих уровнях. Это объясняет известный парадокс модели Бора, когда частоты излучаемых фотонов отличаются от частот вращения электронов.

1.4. Магнито-гармонический ротатор (уровни Фока-Ландау)

Решения уравнения Шредингера для заряда в постоянном однородном магнитном поле $\mathbf{H} = (0, 0, H)$ и соответствующие дискретные уровни энергии были найдены Фоком в 1928 г. [2], который показал, что формально они сводятся к хорошо известным формулам для гармонического осциллятора. Ландау в 1930 г. получил их в другой калибровке и применил к теории диамагнетизма [3]. С тех пор дискретные уровни энергии заряда в постоянном магнитном поле нашли широкое применение. Их принято называть уровнями Ландау, но так как Фок опубликовал решение двумя годами раньше, далее будем называть их уровнями Фока-Ландау.

Наиболее естественный с физической точки зрения выбор калибровки для потенциала электромагнитного поля в однородном магнитном поле имеет вид:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\left[\mathbf{H} \times \mathbf{r}\right]. \tag{20}$$

Уравнение Шредингера с этим потенциалом:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2\psi+\left(E+M\omega_1-\frac{M^2}{2mr^2}-\frac{m\omega_H^2}{8}r^2\right)\psi=0, \qquad (21)$$

даёт уровни энергии:

$$E_{n_r,n_\theta}=\frac{1}{2}\hbar|\omega_H|\left(2n_r+|n_\theta|+1\right)+\frac{1}{2}\hbar\omega_H n_\theta+\frac{p_z^2}{2m}. \qquad (22)$$

Здесь p_z - импульс вдоль магнитного поля, $r^2=x^2+y^2$, ω_H - циклотронная частота:

$$\omega_H=\frac{eH_z}{mc}. \qquad (23)$$

Поскольку в магнитном поле движение на плоскости вращения в классическом случае симметрично относительно обеих осей и происходит *только* по круговым орбитам, то в квантовом случае радиальных возбуждений нет ($n_r=0$). Энергия же нулевых радиальных колебаний заряженной частицы трансформируется магнитным полем в энергию «нулевых вращений» без изменения величины этой энергии и поэтому наинизший уровень на плоскости вращения (без энергии движения вдоль поля) сводится к $E_0=\hbar|\omega_H|/2$. В результате, уровни (22) приобретают вид:

$$E_{n_\theta\pm}=\frac{1}{2}\hbar|\omega_H|\left(|n_\theta|\pm n_\theta+1\right)+\frac{p_z^2}{2m}. \qquad (24)$$

Здесь знак n_θ соответствует знаку частоты вращения ω_H (23), зависящего (при выбранном направлении магнитного поля) от знака заряда частицы. При этом, в (24) для каждого знака ω_H (или знака заряда) вклад в энергию дают только уровни с $\omega_H n_\theta>0$, а вклады уровней с $\omega_H n_\theta<0$ исчезают:

$$E_{n_\theta}=\begin{cases}\hbar|\omega_H|\left(|n_\theta|+1/2\right), & \omega_H n_\theta>0,\\ \hbar|\omega_H|/2 & \omega_H n_\theta<0.\end{cases} \qquad (25)$$

При учёте спина s основной уровень расщепляется на два подуровня:

$$E_{0,s}=\hbar|\omega_H|\left(s+\frac{1}{2}\right). \qquad (26)$$

В результате, для фермиона с $s=\pm 1/2$ наинизший уровень будет в нуле $E_{0,-1/2}=0$, а следующий уровень $E_{0,+1/2}=\hbar|\omega_H|$ и все последующие уровни двукратно вырождены.

Таким образом, задача о движении заряда в постоянном однородном магнитном поле фактически есть задаче о *магнито-гармоническом ротаторе* с гармоническим потенциалом, уравновешивающим центробежную силу, а также с энергиями магнитного и спинового расщеплений. Эта модель широко применяется практически во всех задачах физики конденсированных состояний и астрофизики, где проявляются квантовые эффекты в магнитных полях.

Итак, спектр энергий магнито-гармонического ротатора, с одной стороны, имеет ряд свойств, общих со спектром гармонического осциллятора:

1) частоты всех уровней *одинаковы*;

2) график зависимости энергии от растяжения есть *парабола*;

3) уровни энергии *эквидистантны*;

4) в основном состоянии *есть нулевая энергия*.

С другой стороны, имеется и ряд отличий от гармонического осциллятора:

1) состояния *двукратно вырождены* для двух направлений вращения;

2) энергии пропорциональны угловому моменту и частоте: $E_n = M_n\omega_n$

3) в основном состоянии $n_\theta = 0$ *нет нулевой энергии* и *нулевого момента от вращательных мод*, а нулевая энергия от колебательных мод может быть компенсирована при спиновом расщеплении;

4) уровни энергии симметричны относительно нуля $E_0 = 0$;

5) киральная симметрия состояний в обеих направлениях времени;

6) соответствующий киральный заряд $Q = \mathbf{n}_z\mathbf{M}$ сохраняется.

Главное свойство движения в однородном магнитном поле – это то, что при включении магнитного поля значение скорости заряда в этот момент *целиком становится тангенциальной* компонентой скорости $\mathrm{v} = (0, r\dot{\theta})$, а *радиальная компонента скорости исчезает* $\dot{r} = 0$ и более не появляется. Это означает, что в магнитном поле в классическом случае радиальных осцилляций нет и имеют место лишь вращения в чистом виде. Поэтому, хотя здесь и можно использовать формальную аналогию с гармоническим осциллятором, но с учётом связи $\dot{r} = 0$.

2. Модель гармонического ротатора

2.1. Классический гармонический ротатор

Исчезновение радиальной компоненты скорости, проявившееся в модели магнито-гармонического ротатора, далее может быть взято как определяющее свойство нового класса движений систем с гармоническими потенциалами. Если из модели магнито-гармонического ротатора исключить вклады энергий магнитного и спинового расщеплений, специфические для частного случая магнитного поля, то придём к более простой и более общей модели *гармонического ротатора*.

Эта же модель, в свою очередь, есть лишь частный случай моделей мягких ротаторов, у которых лагранжиан включает чисто вращательный кинетический член и потенциал притяжения $V(r)$ на плоскости вращения:

$$L = \frac{1}{2}mr^2\dot{\theta}^2 - V(r). \tag{27}$$

Известные примеры теорий с мягкими ротаторами были рассмотрены в первой части статьи и поэтому в данной второй части в основном будем рассматривать предлагаемую новую модель гармонического ротатора, на примере которого и будут показаны специфические свойства и перспективы применения мягких ротаторов.

В модели гармонического ротатора, следовательно, достаточно оставить потенциал упругих сил $V(r) = \kappa r^2/2$ на плоскости вращения и ограничиться случаем, когда кинетическая энергия сводится к чисто вращательной энергии. Гармонический ротатор имеет общие черты и отличия как по отношению к гармоническому осциллятору, так и по отношению к обычно применяемым моделям жёсткого ротатора и полужёсткого ротатора с двумя центрами осцилляции.

Общие черты и отличия энергии гармонического ротатора от энергии осциллятора наглядно видны при рассмотрении классической частицы массы m, в начальный момент покоившейся в начала координат, но связанной с этой точкой упругой силой. Пусть затем с этой частицей сталкивается другая свободная частица той же массы и передаст кинетическую энергию $mv_r^2/2 = \kappa a^2/2$. Связанная частица тогда отклонится от центра до точки $r = a$, где на мгновение остановится, а её кинетическая энергия перейдёт в потенциальную энергию упругой силы.

Затем, если нет внешнего воздействия, частица вернётся к центру и далее будет совершать радиальные колебания как линейный гармонический осциллятор с полной энергией $E = ma^2\omega^2/2 = \kappa a^2/2$, которая равна кинетической энергии при $r = 0$ или потенциальной энергии при $r = a$.

Если же в момент остановки этой частицы при $r = a$ с ней снова столкнётся ещё одна свободная частица с той же кинетической энергией $mv_\perp^2/2 = \kappa a^2/2$, но с импульсом направленным перпендикулярно радиусу, то связанная частица начнёт вращаться вокруг центра по кругу радиуса $r = a$ и будет представлять собой гармонический ротатор. Полная энергия такого гармонического ротатора $E = \kappa a^2 = ma^2\omega^2$ есть сумма кинетической и потенциальной энергий (которые постоянны и равны друг другу) и вдвое больше полной энергии линейных гармонических осцилляций. При этом, график зависимости полной энергии гармонического ротатора от растяжения a есть парабола с центром в $r = 0$.

Итак, лагранжиан гармонического ротатора включает чисто вращательный кинетический член и гармонический потенциал:

$$L = \frac{1}{2}mr^2\dot{\theta}^2 - \frac{1}{2}\kappa r^2. \tag{28}$$

Здесь радиальная скорость не фигурирует, а r перестаёт быть динамической переменной. Если лагранжиан (28) переписать в виде

$$L = r^2\frac{m}{2}\left(\dot{\theta}^2 - \omega_\pm^2\right), \quad \omega_\pm = \pm\omega = \pm\sqrt{\kappa/m}, \tag{29}$$

то видно, что r^2 превратился в множителя Лагранжа, а соответствующая этому множителю связь $\dot{\theta} = \pm\omega$ даёт независимость угловой скорости (частоты вращения) от радиуса. Сохранение углового момента фиксирует радиус и энергию:

$$r^2 = \frac{M}{m\omega}, \quad E_n = m\omega r^2 = M\omega. \tag{30}$$

Таким образом, энергия гармонического ротатора хотя и равна энергии кругового гармонического осциллятора, но пропорциональна угловому моменту.

Поскольку лагранжиан (29) свёлся к чистой связи, то гамильтониан сводится к произведению импульса на скорость динамической переменной $\theta(t)$ плюс эта же связь, которая сохраняется во времени и тривиально разрешается:

$$H = p_\theta\dot{\theta} - L = M\dot{\theta} - r^2\frac{m}{2}\left(\dot{\theta}^2 - \omega_\pm^2\right) = M\dot{\theta}\Big|_{\dot{\theta}=\omega_\pm} = M_\pm\omega_\pm. \tag{31}$$

Итак, гамильтониан гармонического ротатора оказывается предельно простым и линейно зависит от углового момента и частоты.

В данном случае связи явно решаются и нет необходимости в применении полного формализма гамильтонова квантования систем со связями. Тем не менее, гамильтоново квантование ротатора полезно рассмотреть как для полноты картины, так и для дальнейших применений в присутствии других потенциалов.

Пусть нерелятивистская частица приведённой массы m движется на плоскости в гармоническом потенциале, но со связями $\varphi(r, p_r)$ на радиальные переменные. В случае гармонического ротатора частота вращения, как и у гармонического осциллятора, постоянна, а угловой момент и уровни энергии определяются величиной растяжения. Поэтому в отличие от жёсткого ротатора r не константа, а динамически фиксируемый параметр. Общим же для всех состояний гармонического ротатора является чисто вращательный характер движения вокруг центра, что означает отсутствие радиальной скорости или импульса. Поэтому вначале имеется одна первичная связь, ведущая к занулению радиального импульса:

$$\varphi(r, p_r) = p_r \approx 0. \tag{32}$$

При стандартном каноническом квантовании исходя из гамильтониана частицы на плоскости с гармоническим потенциалом

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{M^2}{2mr^2} + \frac{1}{2}kr^2. \tag{33}$$

строится обобщённый гамильтониан со связью (32):

$$\tilde{H} = H + \lambda p_r, \tag{34}$$

где $\lambda(t)$ - лагранжев множитель, и затем находится лагранжиан $\tilde{L} = p_r\dot{r} + M\dot{\theta} - \tilde{H}$.

Уравнение движения по радиальной координате на поверхности связей $p_r \approx 0$ тогда есть уравнение равновесия между упругой и центробежной силами:

$$-\frac{M^2}{mr^3} + kr = 0. \tag{35}$$

Учёт явного выражение для M даёт тогда условие постоянства частоты вращения $\dot{\theta} = \pm\omega = \pm\sqrt{k/m}$.

Скобка Пуассона связи (32) с гамильтонианом также сводится к условию равновесия (35) и исчезает на поверхности связей:

$$\left\{\tilde{H}, \varphi\right\} = \left\{H, p_r\right\} = \frac{1}{2m}\left\{\frac{M^2}{r^2} + kr^2, p_r\right\} = \frac{1}{m}\left(-\frac{M^2}{r^3} + kr\right) \approx 0. \tag{36}$$

В результате вторичных связей не возникает и далее, исключив r из выражения для энергии с помощью (35), приходим к (31).

Как видим, результат стандартного канонического квантования с физической точки зрения полностью совпадает с приведённым выше простым способом, когда r^2 входит в лагранжиан как лагранжев множитель и для r импульс не вводится.

Случай *жёсткого* ротатора (см. раздел 1.1) соответствует первичной связи $\varphi = r^2 - a^2$. Здесь после разрешения связи r становится равной заданной извне константе a и его импульс зануляется, а потенциал вырождается в аддитивную константу, которую можно опустить. В результате лагранжиан на поверхности связей приходит к обычному виду, где присутствует лишь кинетический член для угловой переменной $M^2/2ma^2$, а переходы на разные уровни энергии происходят только за счёт изменения частоты вращения при фиксированной длине.

2.2. Квантование гармонического ротатора

Собственные значения M_n и собственные функции $\psi_n(\theta)$ углового момента на плоскости есть:

$$-i\hbar\frac{\partial\psi_n}{\partial\theta} = M_n\psi_n = n\hbar\,\psi_n, \tag{37}$$

$$\psi_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{in\theta}. \tag{38}$$

Поэтому соответствующее уравнение Шредингера для гармонического ротатора:

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \frac{1}{2}\kappa r^2\psi \tag{39}$$

решается также просто и результаты совпадают с результатами приведённого наглядного вывода. Действительно, полная энергия согласно (39), с добавлением энергии нулевых радиальных колебаний на плоскости вращения $E_0 = \hbar\omega$, есть:

$$E_n = \frac{n^2\hbar^2}{2mr_n^2} + \frac{1}{2}\kappa r_n^2 + E_0 \tag{40}$$

и, в сочетание с собственными значениями углового момента (37), позволяет выразить r_n^2 и получить выражение для уровней энергии:

$$r_n^2 = \frac{|M_n|}{m\omega} = \frac{|n|\hbar}{m\omega}, \tag{41}$$

$$E_n = |M_n|\,\omega + E_0 = \hbar\omega\big(|n|+1\big) = |Q_n|\,\omega, \tag{42}$$

где $Q_n = -(M_n + 1)$ есть оператор «заряда». Как видим, *спектр энергии гармонического ротатора практически совпадает со спектром линейного гармонического осциллятора*, но с тем отличием, что нулевая энергия основного состояния не относится к вращательным степеням свободы. Квантование энергии гармонического ротатора тем самым сводится к квантованию углового момента и практически совпадает со спектром оператора «заряда».

При сравнении спектра энергий гармонического ротатора со спектром энергий гармонического осциллятора имеются три общих свойства и три различия. Общие свойства состоят в том, что:

1) частоты всех уровней *одинаковы*;

2) график зависимости энергии от растяжения есть *парабола*;

3) уровни энергии *эквидистантны*.

Отличия же состоят в том, что в спектре гармонического ротатора:

1) уровни энергии *двукратно вырождены*;

2) в основном состоянии *нет нулевой энергии и нулевого момента* (*заряда*);

3) уровни энергии *пропорциональны* угловому моменту (заряду) и частоте.

Свойства гармонического ротатора характерны для многих систем с комплексными переменными, в частности, релятивистских полей, и поэтому их квантование естественно производить на базе модели гармонического ротатора. В системах с зарядовой симметрией вместо углового момента фигурирует оператор заряда системы. Ключевая симметрия таких систем - это симметрия между зарядово-сопряжёнными состояниями одного и того же знака энергии.

2.3. Квантование вращающейся цепочки гармонических ротаторов

Спектр гармонического ротатора эквидистантен, может начинаться с нуля и двукратно вырожден, что представляет интерес при квантовании релятивистских полей с калибровочными и зарядовыми симметриями. Но поля должны быть аналогичны цепочкам ротаторов очень малого шага, которых далее и рассмотрим.

Пусть имеется совокупность N одинаковых гармонических ротаторов, каждый из которых образован двумя упруго связанными и вращающимися на плоскостях (x, y, z_i), где $i = 1, ..., N$, частицами *A* и *B* и пусть центры инерции этих ротаторов расположены с шагом d вдоль общей оси вращения z. При одинаковой угловой скорости ω_0 и одинаковых начальных условиях вся совокупность ротаторов вращается когерентно и, из-за сохранения углового момента, каждый из них остаётся на своей плоскости вращения. Энергия системы при этом равна:

$$E_N = N_+ M_+ \omega_{0+} + N_- M_- \omega_{0-} + E_0, \tag{43}$$

где $M_\pm$ - угловой момент одного ротатора.

Соединим теперь с помощью упругой силы $\kappa(r_{i+1} - r_i)$ каждую из двух частиц каждого из ротаторов с аналогичными частицами двух соседних ротаторов (A_i с $A_{i\pm 1}$ и B_i с $B_{i\pm 1}$), образовав двойную одномерную цепочку из $2N$ частиц. В непрерывном пределе эта двойная цепочка образует две массивные струны, соединённые эластичной плёнкой небольшой ширины.

Частота вращения каждого из гармонических ротаторов $\omega_0 = \sqrt{\kappa / m}$ постоянна и связи с соседями её не меняют. Они лишь изменяют угловой момент при дополнительном растяжении на плоскости вращения, а из-за сохранения углового момента и слабости связей с соседями, каждый ротатор остаётся на своей плоскости вращения.

Пусть теперь приложенная внешняя сила придаёт одному из ротаторов в цепочке дополнительный угловой момент и соответствующую энергию. При этом тот растягивает двух своих ближайших соседей, передав им часть углового момента и энергии, а те затем действуют на последующие и угловой момент будет передаваться по цепочке. Вся цепочка при этом продолжает вращаться синхронно, только малый бугорок растяжения перемещается по цепочке и в системе распространяется *поперечная волна растяжений* ротаторов с изменением и обратным возвратом угловых моментов.

Длина этой волны $\lambda = l'd$ определяется числом l' ротаторов, охваченных одним периодом волны. Соответствующий волновой вектор $\mathbf{k}_z = 2\pi \mathbf{n}_z / \lambda$ направлен вдоль оси z и в дальнейшем будет задавать импульс кванта волны. С этим волновым вектором связана «продольная» частота распространения волны, которая есть произведение k_z на скорость волны $\omega_z = v k_z$. Таким образом, два гребня волны противоположных концов ротаторов на плоскости (x, y) вращаются с общей частотой вращений ω_0, перемещаясь вдоль z со скоростью v_z, так что их путь в пространстве - это две спиралевидные кривые вокруг оси z.

В квантовой теории, где каждый из ротаторов имеет квантованный угловой момент и соответствующий уровень энергии, прохождение волны состоит в переходе ротатора из своего уровня на соседний и обратно. Если одному из ротаторов был *передан* внешней силой единичный угловой момент, то при передаче этого возмущения по цепочке каждый из ротаторов цепи попеременно переходит на более *высокий* уровень и обратно, так что речь идёт о распространении *квазичастицы*. Если же от одного из ротаторов был *отнят* внешней силой единичный угловой момент, то при передаче этого возмущения по цепочке каждый из ротаторов цепи попеременно переходит на более *низкий* уровень и обратно, что ведёт к распространению *дырки*. Если к одному и тому же ротатору с одной стороны цепочки поступает квазичастица, а с другой стороны одновременно поступит – дырка, то изменения углового момента не будет, так что речь идёт о *рекомбинации* этих возмущений.

В системе не связанных друг с другом, но расположенных вдоль общей оси вращения и когерентно вращающихся ротаторов имеется *вращательная симметрия* $O(2)$ в пространстве двух степеней свободы (x_i, y_i). Однако, когда ротаторы образуют упруго связанную цепочку, связи ротаторов друг с другом приводят к новому эффекту топологической природы. Система переходит в себя не при повороте на 2π отдельного ротатора в цепочке, а при его повороте на 4π, так что группой симметрии при вращениях становится $SU(2)$. Действительно, поворот на 2π одного из ротаторов без поворота границ цепочки меняет связи с соседями и, очевидно, есть другое состояние. При повороте же этого ротатора на 4π цепочка может быть распутана (методом Дирака) и возвращена в состояние до поворота без изменения границ цепочки и без изменения ориентации повёрнутого ротатора. Это означает, что в цепочке связанных ротаторов естественным образом возникают кванты в спинорном представлении группы вращений.

Более детальное рассмотрение квантовой теории таких цепочек и следствий их свойств симметрии будет приведено в последующей статьях.

Заключение

Итак, отсутствие радиальной компоненты скорости, впервые проявившееся в чистом виде в магнито-гармоническом ротаторе, есть определяющее свойство мягких ротаторов, в частности, гармонического ротатора. Исходя из опыта построения применяемых на практике моделей мягких ротаторов, это свойство позволяет сформулировать их общую теорию, в частности, теорию гармонического ротатора.

Квантование волн при коллективных вращениях одномерной цепочки гармонических ротаторов позволяет моделировать поля с вращательной симметрией и, возможно, со спинорными возбуждениями.

В следующих статьях будет развито вращательное квантование систем, где частоты квантов относятся к частоте вращения гармонических ротаторов или полевых векторов. Новым при этом будет не только естественность включения в теорию угловых и спиновых наблюдаемых, но и возможность исключить нулевую энергию и нулевой заряд основного состояния, как это происходит при спиновом расщеплении основного уровня магнито-гармонического ротатора.

Литература

1. Bohr N. (1913) Phyl. Mag. **26**, 1.
2. Fock V. (1928) Zs. Phys., **47**, 446.

3. Landau L.D. (1930) Zs. Phys., **64**, 629.