ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р2 - 3223

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Н.А. Черников

СИСТЕМА С ГАМИЛЬТОНИАНОМ В ВИДЕ ЗАВИСЯЩЕЙ ОТ ВРЕМЕНИ КВАДРАТИЧНОЙ ФОРМЫ ОТ $\hat{x}$ и $\hat{p}$

1967 г.

P2 - 3223

Н.А. Черников

СИСТЕМА С ГАМИЛЬТОНИАНОМ В ВИДЕ ЗАВИСЯЩЕЙ ОТ ВРЕМЕНИ КВАДРАТИЧНОЙ ФОРМЫ ОТ $\hat{x}$ И $\hat{p}$

§ 1. Введение

В данной работе мы рассмотрим уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H(t, \hat{x}, \hat{p})\Psi \tag{1.1}$$

для системы с ν степенями свободы и гамильтонианом в виде произвольно зависящей от времени t квадратичной формы от координат $\hat{x}$ и импульсов $\hat{p}$:

$$H(t,\hat{x},\hat{p}) = \frac{1}{2}\{A_{\alpha\beta}(t)\hat{x}^{\alpha}\hat{x}^{\beta} + B^{\beta}_{\alpha}(t)(\hat{x}^{\alpha}\hat{p}_{\beta} + \hat{p}_{\beta}\hat{x}^{\alpha}) + C^{\alpha\beta}(t)\hat{p}_{\alpha}\hat{p}_{\beta}\}. \tag{1.2}$$

По повторяющимся греческим индексам здесь и далее подразумевается суммирование от 1 до ν . К такой задаче, только с бесконечным числом степеней свободы, приводит проблема квантования полей в произвольно заданном псевдоримановом пространственно-временном мире. Но рассматриваемая задача, очевидно, интересна и независимо от ее приложений к квантовой теории поля.

Конечно, решить эту задачу в уже изученных функциях в общем случае невозможно. Это невозможно даже для соответствующих классических уравнений Гамильтона:

$$\frac{dx^{\alpha}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} = B^{\alpha}_{\beta}(t)x^{\beta} + C^{\alpha\beta}(t)\,p_{\beta} \tag{1.3а}$$

$$\frac{dp_{\alpha}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x^{\alpha}} = -A_{\beta\alpha}(t)x^{\beta} - B^{\beta}_{\alpha}(t)\,p_{\beta}\,. \tag{1.3б}$$

Но здесь будет показано, как построить полную систему решений уравнения (1.1), коль скоро известно общее решение

$$x^\alpha = K^\alpha_\beta(t)\,x^\beta_0 + L^{\alpha\beta}(t)\,p^0_\beta, \qquad x^\alpha\big|_{t=t_0} = x^\alpha_0, \tag{1.4a}$$

$$p_\alpha = M_{\beta\alpha}(t)\,x^\beta_0 + N^\beta_\alpha(t)\,p^0_\beta, \qquad p_\alpha\big|_{t=t_0} = p^0_\alpha \tag{1.4б}$$

уравнений (1.3). Таким образом, здесь будет доказано, что фактически известно поведение квантовой системы с гамильтонианом (1.2), коль скоро известно поведение соответствующей классической системы.

В следующем параграфе предпринята попытка удовлетворить уравнению Шредингера функцией вида:

$$\Psi = \sqrt{\rho}\; e^{\frac{i\sigma}{h}}, \tag{1.5}$$

приравнивая нулю все коэффициенты при степенях h. Оказывается, что для гамильтониана (1.2) это возможно. В третьем параграфе найдено общее решение такого вида. Мы будем называть его основным решением уравнения Шредингера. Каждое основное решение характеризуется $\nu+1$ комплексными параметрами $u_0, u_1, \dots, u_\nu$ и $\frac{\nu(\nu+1)}{2}$ комплексными параметрами $S_{\alpha\beta} = S_{\beta\alpha}$. Параметры $u_0, u_1, \dots, u_\nu$ произвольны. На вещественную часть матрицы $S_{\alpha\beta} = R_{\alpha\beta} + iQ_{\alpha\beta}$ не накладывается никаких ограничений, кроме условия симметричности. Матрица $Q_{\alpha\beta}$ предполагается положительно определенной. Это нужно для того, чтобы основное решение имело норму. Функция ρ удовлетворяет уравнению непрерывности и равняется:

$$\rho = \rho_0 \left\| K^\alpha_\beta(t) + L^{\alpha\gamma}(t)\,S_{\gamma\beta} \right\|^{-1}, \tag{1.6}$$

где ρ_0 – нормировочная константа. Функция σ удовлетворяет уравнению Гамильтона-Якоби

$$\frac{\partial\sigma}{\partial t} + \frac{1}{2}\left\{ A_{\alpha\beta}(t)\,x^\alpha x^\beta + 2B^\beta_\alpha(t)\,x^\alpha \frac{\partial\sigma}{\partial x^\beta} + C^{\alpha\beta}(t)\,\frac{\partial\sigma}{\partial x^\alpha}\frac{\partial\sigma}{\partial x^\beta} \right\} = 0 \tag{1.7}$$

и начальному условию:

$$\sigma\big|_{t=t_0} = u_0 + u_\alpha x^\alpha + \frac{1}{2} S_{\alpha\beta}\,x^\alpha x^\beta. \tag{1.8}$$

В отношении параметров $u_0, u_1, \dots, u_\nu$ функция σ является полным интегралом уравнения (1.7).

Дифференцируя по параметрам u_α основное решение уравнения Шредингера, мы получаем все новые и новые его решения. Это позволило ввести в четвертом параграфе производящую Ψ -функцию, которая сама является решением уравнения Шредингера и дает полную ортогональную систему его решений. Последние отличаются от основного решения множителем в виде полинома Эрмита-Чебышева от некоторых линейных комбинаций координат x_α с коэффициентами, зависящими от времени.

Благодаря этому для системы с гамильтонианом (1.2) в пятом параграфе удалось ввести представление Фока [1], столь удобное в квантовой теории поля. В соответствии с терминологией, принятой в квантовой теории поля, основное решение уравнения Шредингера называется вакуумным состоянием; остальные решения, которые дает производящая функция, - состояниями с заданным числом частиц. Операторы $\hat{x}^\alpha$ и $\hat{p}_\alpha$ выступают при этом в качестве полевых операторов. Через них определенным образом выражаются операторы уничтожения и рождения частиц. Ввиду конечного числа степеней рассматриваемой здесь системы пространство конфигураций введенных таким образом частиц состоит всего из ν точек.

Этот результат нетривиален даже для простейшей системы, когда $A = E$, $B = 0$, $C = E$: известный результат относится здесь лишь к весьма частному $u = 0$, $R = 0$, $Q = E$.

Определив вакуумное состояние как указанное выше основное решение с параметрами S, u, мы значительно расширили это понятие, ибо обычно вакуумное состояние принято связывать с наименьшим значением энергии. В общем случае зависящего от времени гамильтониана (1.2) аналогом энергии могло бы явиться его среднее вакуумное значение. Но в нашем рассмотрении гамильтониан (1.2) не обязательно должен быть положительно определенным. Поэтому в общем случае нельзя ставить вопрос о его наименьшем среднем значении. Но даже если условиться, что гамильтониан (1.2) положительно определен в каждый момент времени, его среднее по вакууму будет зависеть от времени, и его не удается минимизировать в каждый момент времени, варьируя константы S, u. Правда, на этом пути можно прийти к равенству $u = 0$. Действительно, как можно показать,

$$\langle 0|H(t,\hat{x},\hat{p})|0\rangle = H(t,\bar{x},\bar{p}) +$$

$$+\frac{h}{4}\ \text{след}\quad Q^{-1}(K'+S^*L'\ \ M+S^*N)\begin{pmatrix} A & B' \\ B & C \end{pmatrix}\begin{pmatrix} K+LS \\ M'+N'S \end{pmatrix}, \tag{1.9}$$

где

$$\bar{x} = \langle 0|\hat{x}|0\rangle = \frac{1}{2}[(K+LS^*)Q^{-1}u' - (K+LS)Q^{-1}u\ ], \tag{1.10}$$

$$\bar{p} = \langle 0|\hat{p}|0\rangle = \frac{1}{2}[uQ^{-1}(M+S^*N) - u^*Q^{-1}(M+SN)].$$

Примененные здесь матричные обозначения объяснены в § 3. Средние вакуумные $\bar{x}$, $\bar{p}$ подчиняются классическим уравнениям Гамильтона (1.3). Если гамильтониан положительно определен в каждый момент времени, то $H(t,\hat{x},\hat{p}) > 0$, коль скоро не все $\bar{x}$, $\bar{p}$ равны нулю, и $H(t,0,0)=0$. Но если $\bar{x}=0$, $\bar{p}=0$, то $u=0$. След матрицы во втором слагаемом (1.9) может зависеть от времени, и тогда не удается минимизировать его в каждый момент времени ни при каком выборе параметров S.

В случае не зависящего от времени гамильтониана, но не положительно определенного, принцип минимума также не действует. Например, при $A=0$, $B=0$, $C=E$ из условия минимума мы получили бы $\bar{p}=0$, $S=0$. Но последнее равенство противоречит условию положительной определенности матрицы Q. Кроме того $\bar{x}$ остается совершенно произвольным.

Тем не менее, представление Фока, а в частности, и предложенное широкое толкование вакуума допустимо в самом общем случаем гамильтониана (1.2). Если же указан некоторый положительно определенный интеграл движения, то оптимальный выбор параметров можно задать условием минимума его среднего значения по вакууму.

§ 2. Попытка решить уравнение Шредингера

Уравнение Шредингера мы будем решать в x-представлении, полагая

$$\Psi=\Psi(t,x^1,\dots,x^\nu),\quad \hat{x}^\alpha = x^\alpha,\quad \hat{p}_\alpha = -ih\frac{\partial}{\partial x^\alpha}\,. \tag{2.1}$$

Если представить Ψ в виде (1.5), где ρ и σ – некоторые функции от t, x^1, ..., x^ν (мы не требуем, чтобы они были вещественными!), то уравнение (1.1) запишется в виде:

$$\frac{\partial\sigma}{\partial t} + H(t,x,\frac{\partial\sigma}{\partial x}) = \frac{ih}{2\rho}\left[\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^\alpha}(\rho v^\alpha)\right] + \frac{h^2}{2\sqrt{\rho}}C^{\alpha\beta}(t)\frac{\partial^2\sqrt{\rho}}{\partial x^\alpha\partial x^\beta}, \tag{2.2}$$

где
$$v^\alpha = B^\alpha_\beta(t)x^\beta + C^{\alpha\beta}(t)\frac{\partial\sigma}{\partial x^\beta}\,. \tag{2.3}$$

Попытаемся решить уравнение (2.2), приравнивая нулю коэффициенты при степенях h. Нулевая степень дает уравнение Гамильтона-Якоби (1.7), первая степень – уравнение непрерывности

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^\alpha}(\rho v^\alpha) = 0, \tag{2.4}$$

наконец, вторая степень – уравнение

$$C^{\alpha\beta}(t)\frac{\partial^2\sqrt{\rho}}{\partial x^\alpha\partial x^\beta} = 0. \tag{2.5}$$

Пусть функция $\sigma=\sigma(t,x^1,\dots,x^\nu)$ удовлетворяет уравнению Гамильтона-Якоби (1.7) и в начальный момент времени $t=t_0$ равняется $\sigma|_{t=t_0} = \phi(x^1,\dots,x^\nu)$. Воспользовавшись известной в теории обыкновенных дифференциальных уравнений теоремой Лиувилля-Линделёфа, из уравнения (2.4) нетрудно найти функцию ρ. Ввиду важности вопроса мы приведем детальные выкладки.

Если подставим в (1.3а) $p_\beta = \frac{\partial\sigma}{\partial x^\beta}$, то получим систему ν обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dx^\alpha}{dt} = B^\alpha_\beta(t)x^\beta + C^{\alpha\beta}(t)\frac{\partial}{\partial x^\beta}\sigma(t,x^1,\dots,x^\nu) = v^\alpha. \tag{2.6}$$

Общее решение этой системы мы найдем, если подставим
$p^0_\beta = \frac{\partial}{\partial x^\beta_0}\phi(x^1_0,\dots,x^\nu_0)$ в (1,4а) :

$$x^{\alpha}=K^{\alpha}_{\beta}(t)\,x^{\beta}_{0}+L^{\alpha\beta}(t)\frac{\partial}{\partial x^{\beta}_{0}}\phi(x^{1}_{0},\dots,x^{\nu}_{0}). \qquad (2.7)'$$

Отсюда получаются первые интегралы $x^{\alpha}_{0}=x^{\alpha}_{0}(t,x^{1},\dots,x^{\nu})$ системы уравнений (2.6). Они подчиняются уравнению в частных производных

$$\frac{\partial x^{\alpha}_{0}}{\partial t}+v^{\beta}\frac{\partial x^{\alpha}_{0}}{\partial x^{\beta}}=0. \qquad (2.8)$$

Дифференцируя (2.8) по x^{γ}, получаем

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+v^{\beta}\frac{\partial}{\partial x^{\beta}}\right)\frac{\partial x^{\alpha}_{0}}{\partial x^{\gamma}}=-\frac{\partial v^{\beta}}{\partial x^{\gamma}}\,\frac{\partial x^{\alpha}_{0}}{\partial x^{\beta}}. \qquad (2.9)$$

Следовательно,

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+v^{\beta}\frac{\partial}{\partial x^{\beta}}\right)\frac{\partial(x^{1}_{0},\dots,x^{\nu}_{0})}{\partial(x^{1},\dots,x^{\nu})}=-\frac{\partial(x^{1}_{0},\dots,x^{\nu}_{0})}{\partial(x^{1},\dots,x^{\nu})}\,\frac{\partial v^{\beta}}{\partial x^{\beta}}. \qquad (2.10)$$

Тем самым мы нашли решение уравнения (2.4):

$$\rho=\rho_{0}\,\frac{\partial(x^{1}_{0},\dots,x^{\nu}_{0})}{\partial(x^{1},\dots,x^{\nu})}=\rho_{0}\left\|K^{\alpha}_{\beta}(t)+L^{\alpha\gamma}(t)\frac{\partial^{2}}{\partial x^{\gamma}_{0}\partial x^{\beta}_{0}}\phi(x^{1}_{0},\dots,x^{\nu}_{0}\right\|^{-1}. \qquad (2.11)$$

Чтобы удовлетворить уравнению (2.5), достаточно задать начальную функцию ϕ в виде полинома второй степени (1.8). В таком случае ρ вообще не зависит от $x^{1},\dots,x^{\nu}$ и равняется (1.6).

Таким образом, наша попытка решить уравнение (2.2), а тем самым и уравнение Шредингера, оправдалась. Остается лишь решить уравнение Гамильтона-Якоби (1.7) с начальной функцией (1.8).

§ 3. Основное решение

Для краткости и, добавим, выразительности письма применим матричное исчисление. Совокупности величины вида x^{α}; $A_{\alpha\beta}$, B^{β}_{α}, $C^{\alpha\beta}$ расположим следующим образом:

$$x=\begin{pmatrix} x^1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x^\nu \end{pmatrix} \quad A=\begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1\nu} \\ \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \cdot \\ A_{\nu 1} & \dots & A_{\nu\nu} \end{pmatrix} \quad B=\begin{pmatrix} B^1_1 & \dots & B^1_\nu \\ \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \cdot \\ B^\nu_1 & \dots & B^\nu_\nu \end{pmatrix} \quad C=\begin{pmatrix} C^{11} & \dots & C^{1\nu} \\ \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \cdot \\ C^{\nu 1} & \dots & C^{\nu\nu} \end{pmatrix}.$$

Совокупность величин вида p_α расположим в строку $p=(p_1 \dots p_\nu)$. Производные $\frac{\partial}{\partial x^\alpha}$ образуют строку $\frac{\partial}{\partial x}$, а производные $\frac{\partial}{\partial p_\alpha}$ – столбец $\frac{\partial}{\partial p}$. Столбцы и строки типа x, p будем считать прямоугольными матрицами. Штрихом будем обозначать транспонирование. Так, транспонированный столбец x является строкой x', а транспонированная строка p –столбцом p'. Матрицы A и C, входящие в гамильтониан, симметричны, то –есть $A'=A$, $C'=C$. Симметрична и матрица S, входящая в начальное условие (1.8).

В матричных обозначениях уравнения Гамильтона запишутся в виде:

$$\frac{dx}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p}=Bx+Cp', \quad \frac{dp}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial x}=-x'A-pB, \tag{3.1}$$

а их решение – в виде:

$$\begin{aligned} x&=Kx_0+Lp_0', \quad x|_{t=t_0}=x_0, \\ p&=x_0'M+p_0N, \quad p|_{t=t_0}=p_0. \end{aligned} \tag{3.2}$$

Нам надо решить уравнение Гамильтона-Якоби:

$$\frac{\partial\sigma}{\partial t}+\frac{1}{2}\{x'Ax+2\frac{\partial\sigma}{\partial x}Bx+\frac{\partial\sigma}{\partial x}C\frac{\partial\sigma}{\partial x'}\}=0 \tag{3.3}$$

с начальным условием

$$\sigma|_{t=t_0}=\phi(x)=u_0+ux+\frac{1}{2}x'Sx. \tag{3.4}$$

По методу характеристик имеем:

$$\frac{d\sigma}{dt}=-H+p\frac{\partial H}{\partial p}=\frac{1}{2}\{pCp'-x'Ax\}=\frac{1}{2}\frac{d}{dt}px. \tag{3.5}$$

Отсюда

$$\sigma=\phi(x_0)-\frac{1}{2}\frac{\partial\phi(x_0)}{\partial x}x_0+\frac{1}{2}px=u_0+\frac{1}{2}(ux_0+px). \tag{3.6}$$

Чтобы выразить x_0 и p в зависимости от x, надо подставить:

$$p_0 = \frac{\partial}{\partial x_0} \phi(x_0) = u + x_0' S \tag{3.7}$$

в решение (3.2) уравнений Гамильтона (3.1):

$$x = (K + LS)x_0 + Lu', \quad p = x_0'(M + SN) + uN. \tag{3.8}$$

Отсюда можно найти x_0, а затем p при условии, что $\|K+LS\| \neq 0$. Мы докажем последнее неравенство, предполагая, что Ψ -функция (1.5) имеет норму. Для этого нам потребуются некоторые сведения о матрицах K, L, M, N.

Если вектор $\binom{y}{q}'$ фазового пространства так же, как и вектор $\binom{x}{p}'$ подчиняется уравнениям Гамильтона (3.1), то

$$\frac{d}{dt}(qx - py) = 0 \qquad \text{т.е.} \quad qx - py = q_0 x_0 - p_0 y_0. \tag{3.9}$$

Следовательно, решение (3.2) уравнений Гамильтона (3.1) задает симплектическое преобразование фазового пространства. Из (3.9) непосредственно следует матричное равенство

$$\begin{pmatrix} K' & M \\ L' & N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -E \\ E & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K & L \\ M' & N' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -E \\ E & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.10}$$

Отсюда получаем

$$\begin{pmatrix} N & -L' \\ -M & K' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K & L \\ M' & N' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K & L \\ M' & N' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N & -L' \\ -M & K' \end{pmatrix}, \tag{3.11}$$

то есть

$$\begin{gathered} MK = K'M', \quad KL' = LK', \quad KN - LM = N'K' - M'L' = E, \\ NL = L'N', \quad M'N = N'M, \quad NK - L'M' = K'N' - ML = E. \end{gathered} \tag{3.12}$$

Можно также показать, что детерминант любого симплектического преобразования равен единице. Групповые свойства симплектических преобразований очевидны. Формула (3.11) позволяет разрешить уравнения (3.2) относительно x_0 и p_0

$$x_0 = Nx - L'p', \quad p_0 = -x'M' + pK. \tag{3.13}$$

Этих сведений о матрицах K, L, M, N нам будет достаточно.

Разложим теперь матрицу S на действительную и мнимую части

$$S = R + iQ. \tag{3.14}$$

Для того чтобы Ψ -функция (1.5) при $t = t_0$ имела норму, квадратичная форма $x'Qx$ должна быть положительно определенной. Докажем, что в этом случае матрица $K+LS$ имеет обратную. Прежде всего заметим, что матрица

$$\begin{pmatrix} K+LR & L \\ M'+N'R & N' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K & L \\ M' & N' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E & 0 \\ R & E \end{pmatrix} \tag{3.15}$$

симплектическая, так как оба множителя в этом произведении-симплектические матрицы. Ввиду того, что детерминант всякой симплектической матрицы не равен нулю, строки прямоугольной матрицы $(K+LR \;\; L)$ линейно независимы. Если в пространстве этих строк задать скалярное произведение с помощью матрицы $\begin{pmatrix} Q^{-1} & 0 \\ 0 & Q \end{pmatrix}$, то произведение

$$(K+LR \;\; L) \begin{pmatrix} Q^{-1} & 0 \\ 0 & Q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K'+RL' \\ L' \end{pmatrix} = (K+LR)Q^{-1}(K'+RL') + LQL' = G \tag{3.16}$$

будет матрицей Грама для этих строк. Вследствие этого квадратичная форма $x'Gx$ положительно определенна и $\|G\| \neq 0$. Но матрица разлагается в произведение

$$G = (K+LS)Q^{-1}(K'+S^*L') = (K+LS^*)Q^{-1}(K'+SL'). \tag{3.17}$$

Для проверки этого надо воспользоваться (3.12). Из (3.17) следует, что матрица $K+LS$ имеет обратную.

Теперь мы можем решить уравнения (3.8). Однако для определения p удобнее пользоваться другим уравнением, а именно:

$$p(K+LS) - x'(M'+N'S) - u = 0, \tag{3.18}$$

которое следует из (3.13), если туда подставить (3.7). Из (3.8) находим:

$$x_0 = (K+LS)^{-1}x - (K+LS)^{-1}Lu', \tag{3.19}$$

а из (3.18):

$$p = x'(M'+N'S)(K+LS)^{-1} + u(K+LS)^{-1}. \tag{3.20}$$

Подставляя два последних выражения в (3.6), находим, наконец, функцию σ :

$$\sigma = u_0 - \frac{1}{2}u\Gamma L u' + u\Gamma x + \frac{1}{2}x'\Omega x, \tag{3.21}$$

где

$$\Gamma = (K+LS)^{-1}, \quad i\Omega = (M'+N'S)(K+LS)^{-1}. \tag{3.22}$$

С помощью (3.12) нетрудно показать, что $\Omega' = \Omega$, $\Gamma L = L'\Gamma'$.

Собирая вместе формулы (1.5), (1.6) и (3.21), мы получаем основное решение уравнения Шредингера

$$\Psi_0(u) = \sqrt{\rho_0 \|\Gamma\|}\, \exp\{-\frac{x'\Omega x}{2h} + \frac{iu\Gamma x}{h} + \frac{iu_0}{h} - \frac{iu\Gamma L u'}{2h}\}. \tag{3.23}$$

Заметим, что матрица Ω удовлетворяет уравнению Риккати:

$$i\frac{d\Omega}{dt} + A + i\Omega B + iB'\Omega - \Omega C\Omega = 0, \quad i\Omega|_{t=t_0} = S. \tag{3.24}$$

Это следует из уравнений Гамильтона (1.3), которые дают

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} K & L \\ M' & N' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B & C \\ -A' & -B' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} K & L \\ M' & N' \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} K & L \\ M' & N' \end{pmatrix}_{t=t_0} = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix}. \tag{3.25}$$

Если известна матрица Ω , то решать уравнения (1.3) не обязательно. Действительно, тогда матрицу Γ можно найти из уравнения:

$$\frac{d\Gamma}{dt} = -\Gamma(B + iC\Omega), \quad \Gamma|_{t=t_0} = E, \tag{3.26}$$

которое также следует из (3.25). Зная Ω и Γ , можно алгебраическим путем найти ΓL . Именно, из (3.17) находим

$$\Gamma L = -\frac{1}{2}\Gamma[(K+LS)-(K+LS^*)]Q^{-1} = -\frac{1}{2}Q^{-1} + \frac{1}{2}\Gamma G\Gamma'. \tag{3.27}$$

Но, как это следует из (3.17) и (3.12),

$$\Omega = G^{-1} - i[(M'+N'R)Q^{-1}(K'+RL')+N'QL']G^{-1}. \tag{3.28}$$

Таким образом,

$$\Gamma L = -\frac{i}{2} Q^{-1} + i\Gamma[\Omega + \Omega^*]^{-1}\Gamma'. \tag{3.29}$$

Если матрицы A, B, C не зависят от времени, а S является корнем уравнения

$$A + SB + B'S + SCS = 0, \tag{3.30}$$

то, согласно (3.24), $i\Omega = S$. Из (3.26) и (3.29) в этом случае находим:

$$\Gamma = e^{(B+CS)(t_0-t)}, \quad \Gamma L = -\frac{i}{2} Q^{-1} + \frac{i}{2}\Gamma Q^{-1}\Gamma'. \tag{3.31}$$

Уравнение (3.30), однако, может и не иметь корня с положительно определенной мнимой частью Q, и тогда матрицу Ω нельзя считать постоянной, как например, в случае[x)] $A=0$, $B=0$, $C=E$. Если гамильтониан (1.2) положительно определен, то уравнение (3.30) имеет такой корень. При этом значении корня достигается минимум следа матрицы, входящей в (1.9).

§ 4. Производящая Ψ-функция и полная система решений

Так как основное решение (3.23) удовлетворяет уравнению Шредингера при всех значениях $u_0, u_1, \ldots, u_\nu$, то и все его производные по этим параметрам также удовлетворяют тому же уравнению, причем производные по $u_1, \ldots, u_\nu$ линейно независимы. Это следует из того, что:

$$(-ih)^s \frac{\partial^s}{\partial u_{a_1} \ldots \partial u_{a_s}} \Psi_0(u) = \{x_0^{a_1} \ldots x_0^{a_s} + P_{s-1}\}\Psi_0(u), \tag{4.1}$$

---

x) В случае $A=0$, $B=0$, $C=E$ решение вида (3.23) получено В.А.Фоком[/2/] с помощью весьма наглядных представлений.

где x_0^α определяются по формуле (3.19), P_{s-1} – полином степени $s-1$ от $x_0^1, \dots, x_0^\nu$. Однако функции (4.1) неудобны в том отношении, что они неортогональны. Чтобы построить ортогональную систему решений, рассмотрим скалярные произведения функций (4.1). Они, очевидно, равны умноженным на $(-ih)^{r+s}$ производным по $u_{\alpha_1}, \dots, u_{\alpha_r}, v^*_{\beta_1}, \dots, v^*_{\beta_s}$ от интеграла

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0(u)\Psi_0^*(v)\,dx = \tag{4.2}$$

$$= \frac{(\pi h)^{\nu/2}\sqrt{\rho_0\rho_0^*}}{\sqrt{\|Q\|}} \exp\left\{\frac{i(u_0 - v_0^*)}{h} - \frac{1}{4h}(u - v^*)\,Q^{-1}(u' - v^+)\right\}$$

при $v^*_\beta = u^*_\beta$.

Из (4.2) следует, что основное решение будет нормировано на единицу, если положить

$$\rho_0 = (\pi h)^{-\nu/2}\sqrt{\|Q\|}, \quad i(u_0 - u_0^*) = \frac{1}{4}(u - u^*)\,Q^{-1}(u' - u^+). \tag{4.3}$$

Теперь можно найти, что плотность вероятности положений системы в основном состоянии равняется

$$\Psi_0(u)\Psi_0^*(u) = \frac{1}{(\pi h)^{\nu/2}\sqrt{\|G\|}} \exp\left\{-\frac{\Delta x' G^{-1} \Delta x}{h}\right\}, \tag{4.4}$$

где $\Delta x = x - \bar{x}$, а $\bar{x}$ равно (1.10).

Введем далее функцию $\Psi(u,v) = \Psi_0(u - iv)$ при условии, что

$$v_0 = -\frac{1}{4} v Q^{-1} v' - \frac{i}{2} v Q^{-1}(u' - u^+), \tag{4.5}$$

то есть

$$\Psi(u,v) = \Psi_0(u) \exp\left\{\frac{v\Gamma\Delta x}{h} - \frac{1}{4h} v\Gamma G \Gamma' v'\right\}.$$

Из (4.2) и (4.3) следует, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(u,v)\Psi^*(u,w)\,dx = \exp\left\{\frac{1}{2h} v Q^{-1} w^+\right\}. \tag{4.7}$$

Отсюда видно, что производные разных порядков по v_α от $\Psi(u,v)$, взятые при $v = 0$, ортогональны друг к другу. Чтобы ортогонализовать и производные одинаковых порядков, надо представить матрицу Q в виде $Q = \Lambda'\Lambda$. Это достигается в процессе приведения квадратичной формы $x'Q\,x$ к сумме квадратов $y'y$ с помощью линейного преобразования $y = \Lambda x$. Если заменить v на $\sqrt{2h}\,v\Lambda$, то в результате получится функция

$$\tilde{\Psi}(u,v) = \Psi(u, \sqrt{2h}\,v\Lambda) = \tag{4.8}$$

$$= \tilde{\Psi}_0(u)\exp\left\{\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{h}}\,v\Lambda\Gamma\Delta x - \frac{1}{2}\,v\Lambda\Gamma G\Gamma'\Lambda'v'\right\},$$

все производные которой по v_α при $v=0$ ортогональны друг к другу и нормированы на единицу. Эти производные очевидным образом выражаются через полиномы Эрмита-Чебышева и составляют базис в пространстве Ψ-функций.

Все эти производные удовлетворяют рассматриваемому уравнению Шредингера, так как ему удовлетворяет функция (4.8) при всех значениях v. Мы получили таким образом полную систему решений

$$\Psi_0(u)\,H^{\alpha_1\ldots\alpha_s}(u) = \frac{\partial^s}{\partial v_{\alpha_1}\ldots\partial v_{\alpha_s}}\tilde{\Psi}(u,v)\Big|_{v=0} \tag{4.9}$$

уравнения Шредингера с гамильтонианом (1.2). Ввиду этого функцию (4.8) следует называть производящей Ψ-функцией. Отметим, однако, что производящая Ψ-функция удобна и в виде

$$\tilde{\tilde{\Psi}}(u,v) = \Psi(u, \sqrt{2h}\,v) = \Psi_0(u)\exp\left\{\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{h}}\,v\Gamma\Delta x - \frac{1}{2}\,v\Gamma G\Gamma'v\right\}. \tag{4.10}$$

Разложим в ряд по системе (4.9) произвольную Ψ-функцию

$$\Psi = \Psi_0(u)\sum_{s=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{s!}}\,c_{\alpha_1\ldots\alpha_s}H^{\alpha_1\ldots\alpha_s}(u) \tag{4.11}$$

Коэффициенты этого ряда следует считать симметричными относительно индексов α. Если эти коэффициенты не зависят от времени, то Ψ-функция (4.11) представляет общее решение уравнения Шредингера.

Подсчитаем норму Ψ-функции (4.11). Имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\Psi}(u,v)\,\tilde{\Psi}^*(u,w)\,dx = e^{vw^+}. \tag{4.12}$$

Дифференцируя этот интеграл по v, получаем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0(u)\, H^{\alpha_1 \ldots \alpha_s}(u)\, \tilde{\Psi}^*(u,w)\, dx = w^*_{\alpha_1} \cdots w^*_{\alpha_s} \, . \tag{4.13}$$

Следовательно, для Ψ – функции (4.11) находим

$$\Phi(w^*) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \tilde{\Psi}^*(u,w)\, dx = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{s!}}\, c_{\alpha_1 \ldots \alpha_s} w^*_{\alpha_1} \cdots w^*_{\alpha_s} \, . \tag{4.14}$$

Дифференцируя (4.14) по w^*, получаем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi\, [\Psi_0(u)\, H^{\alpha_1 \ldots \alpha_s}(u)]^*\, dx = \sqrt{s!}\, c_{\alpha_1 \ldots \alpha_s} \, . \tag{4.15}$$

Отсюда находим квадрат нормы Ψ -функции (4.11)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi \Psi^*\, dx = \sum_{s=0}^{\infty} c_{\alpha_1 \ldots \alpha_s} c^*_{\alpha_1 \ldots \alpha_s} \, . \tag{4.16}$$

Формулы (4.11) и (4.14) позволяют решить произвольную задачу Коши для уравнения Шредингера с гамильтонианом (1.2).

§ 5. Представление Фока

Результаты предыдущего параграфа указывают, что коэффициенты c_0, c_α, $c_{\alpha\beta}$, ... образуют столбец Фока /1/. По терминологии, принятой в квантовой теории поля, основное решение будем называть вакуумным состоянием, а решение (4.9) s –частичным состоянием. Пространство конфигураций "частицы" состоит здесь всего из ν точек. Формула (4.14) дает функционал Фока /1/.

Найдем теперь операторы уничтожения и рождения частиц. Для этого заметим, что основное решение (3.23), наряду с уравнением Шредингера, удовлетворяет еще системе ν уравнений

$$\{\hat{p}(K + LS) - \hat{x}'(M' + N'S) - u\}\Psi_0(u) = 0. \tag{5.1}$$

Равенство (5.1) легко проверяется непосредственно. Оно соответствует классическому равенству (3.18). Справедливо еще одно классическое равенство, а именно:

$$(K'+S^*L')p'-(M+S^*N)x-u'=2iQx_0. \tag{5.2}$$

К нему очень просто прийти, если из левой части этого равенства вычесть транспонированное к (3.18) и воспользоваться затем равенством (3.13). Классическому равенству (5.2) соответствует квантовое

$$\{(K'+S^*L')p'-(M+S^*N)x-u'\}\Psi_0(u)=2iQx_0\Psi_0(u), \tag{5.3}$$

которое также легко проверяется непосредственно.

Из (5.1) и (5.3) сразу же следуют аналогичные равенства для производящей Ψ -функции (4.8), которая по определению равна: $\Psi_0(u-i\sqrt{2h}\,v\Lambda)$. Условие же (4.5) при дифференцировании по x, очевидно, никак не сказывается. Итак, имеем, во-первых,

$$\{\hat{p}(K+LS)-\hat{x}'(M'+N'S)-u\}\Psi(u,v)=-i\sqrt{2h}\,v\Lambda\tilde{\Psi}(u,v) \tag{5.4}$$

и, во-вторых,

$$\{(K'+S^*L')\hat{p}'-(M+S^*N)\hat{x}-u'+i\sqrt{2h}\Lambda'v'\}\tilde{\Psi}(u,v)= \tag{5.5}$$

$$=2iQ\Gamma(x-Lu'+i\sqrt{2h}L\Lambda'v')\tilde{\Psi}(u,v).$$

Подставляя сюда (3.27), получаем:

$$\{(K'+S^*L')\hat{p}'-(M+S^*N)\hat{x}-u^+\}\tilde{\Psi}(u,v)=$$

$$=\{2iQ\Gamma\Delta x-i\sqrt{2h}\,Q\Gamma G\Gamma'\Lambda'v'\}\tilde{\Psi}(u,v), \tag{5.6}$$

то есть, окончательно,

$$\{(K'+S^*L')\hat{p}'-(M+S^*N)\hat{x}-u^+\}\tilde{\Psi}(u,v)=i\sqrt{2h}\Lambda'\frac{\partial}{\partial v}\tilde{\Psi}(u,v). \tag{5.7}$$

Уже отсюда видно, что искомые операторы уничтожения частиц составляют строку

$$z=\frac{i}{\sqrt{2h}}\{\hat{p}(K+LS)-\hat{x}'(M'+N'S)-u\}\Lambda^{-1}, \tag{5.8}$$

а операторы рождения частиц – эрмитовски сопряженный столбец

$$z^+ = -\frac{1}{\sqrt{2h}} \Lambda'^{-1} \{ (K' + S^*L') p' - (M + S^*N) x - u^+ \}. \tag{5.9}$$

Проверим это утверждение. Согласно (5.4) и (5.7),

$$z \tilde{\Psi}(u,v) = v \tilde{\Psi}(u,v), \quad z^+ \tilde{\Psi}(u,v) = \frac{\partial}{\partial v} \tilde{\Psi}(u,v). \tag{5.10}$$

Рассмотрим ряд:

$$\Psi = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{s!}} c_{a_1 \dots a_s} \frac{\partial^s}{\partial v_{a_1} \dots \partial v_{a_s}} \tilde{\Psi}(u,v) \tag{5.11}$$

более общий, чем (4.11). Последний получается из (5.11), если положить $v=0$. На основании (5.10) заключаем, что в применении к (5.11)

$$z_\beta \Psi = v_\beta \Psi + \sum_{s=0}^{\infty} \frac{\sqrt{s+1}}{\sqrt{s!}} c_{\beta a_1 \dots a_s} \frac{\partial^s}{\partial v_{a_1} \dots \partial v_{a_s}} \tilde{\Psi}(u,v) \tag{5.12}$$

$$z_\beta^+ \Psi = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{s!}} c_{a_1 \dots a_s} \frac{\partial^{s+1}}{\partial v_\beta \partial v_{a_1} \dots \partial v_{a_s}} \tilde{\Psi}(u,v). \tag{5.13}$$

Отсюда следует, что оператор z_β превращает столбец Фока $c_0, c_{a_1}, c_{a_1 a_2}, \dots$ в стобец Фока $\underset{\sim}{c}_0, \underset{\sim}{c}_{a_1}, \underset{\sim}{c}_{a_1 a_2}, \dots$, где

$$\underset{\sim}{c}_{a_1 \dots a_s} = \sqrt{s+1}\; c_{\beta a_1 \dots a_s}, \tag{5.14}$$

и что оператор z_β^+ превращает тот же столбец Фока в столбец $\tilde{c}_0, \tilde{c}_{a_1}, \tilde{c}_{a_1 a_2}, \dots$ где $\tilde{c}_0 = 0$,

$$\tilde{c}_{a_1 \dots a_s} = \frac{1}{\sqrt{s+1}} \{ \delta_{\beta a_1} c_{a_1 \dots a_s} + \dots + \delta_{\beta a_k} c_{a_1 \dots a_{k-1} a_{k+1} \dots a_s} + \dots + \delta_{\beta a_s} c_{a_1 \dots a_{s-1}} \}. \tag{5.15}$$

То есть, операторы z_β и z_β^+ действительно являются операторами уничтожения и рождения частицы в точке β .

Интересно также непосредственно вывести результат действия операторов z и z^+ на функционал Фока (4.14). В силу (4.12) для ряда (5.11) имеем:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(u,w)\Psi dx = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{s!}} c_{\alpha_1\ldots\alpha_s} \frac{\partial^s}{\partial v_{\alpha_1}\cdots\partial v_{\alpha_s}} e^{vw^+} = \Phi(w^*) e^{vw^+} . \tag{5.16}$$

Отсюда и из (5.10) получаем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}^*(u,w) z_\beta \Psi dx = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{s!}} c_{\alpha_1\ldots\alpha_s} \frac{\partial^s}{\partial v_{\alpha_1}\cdots\partial v_{\alpha_s}} v_\beta e^{vw^+} = \frac{\partial}{\partial w^*_\beta} [\Phi(w^*) e^{vw^+}] \tag{5.17}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}^*(u,w) z^+_\beta \Psi dx = \frac{\partial}{\partial v_\beta} [\Phi(w^*) e^{vw^+}] = w^*_\beta \Phi(w^*) e^{vw^+} . \tag{5.18}$$

Следовательно, как и должно быть, оператор z_β превращает функционал Фока $\Phi(w^*)$ в функционал $\frac{\partial}{\partial w^*_\beta}\Phi(w^*)$, а оператор z^+_β – в функционал $w^*_\beta \Phi(w^*)$.

Рассмотрим теперь общее уравнение Шредингера

$$ih \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \{ H + V(t, \hat{x}, \hat{p}) \} \Psi , \tag{5.19}$$

где H – по-прежнему задается формулой (1.2), а V – некоторая добавка к гамильтониану H –задача, типичная в теории возмущений.

Для ряда (5.11) имеем:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}^*(u,w)[ih \frac{\partial}{\partial t} - H] \Psi dx = ih \frac{\partial}{\partial t} \Phi(w^*) e^{vw^+} , \tag{5.20}$$

то есть оператор $ih \frac{\partial}{\partial t} - H$ превращает функционал Фока $\Phi(w^*)$ в $ih \frac{\partial}{\partial t} \Phi(w^*)$.

Следовательно, в представлении Фока уравнение (5.19) запишется в виде:

$$ih \frac{\partial \Phi}{\partial t} = V(t, \hat{x}, \hat{p}) \Phi , \tag{5.21}$$

где $\hat{x}$ и $\hat{p}$ надо выразить через z и z^+.

Для этого заметим, что

$$\begin{pmatrix} -M - SN & K' + SL' \\ -M - S^*N & K' + S^*L' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K + LS^* & -K - LS \\ M' + N'S^* & -M' - N'S \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2iQ & 0 \\ 0 & -2iQ \end{pmatrix} . \tag{5.22}$$

Первая из этих матриц взята из (5.8) и (5.9). Вторая построена из первой по образцу (3.11) При вычислении их произведения надо воспользоваться (3.12). С помощью (5.22) нетрудно получить, что

$$
\begin{aligned}
\hat{x} &= \bar{x} + \frac{\sqrt{h}}{\sqrt{2}}[(K+LS^*)\Lambda^{-1} z' + (K+LS)\Lambda^{-1} z^+]. \\
\hat{p} &= \bar{p} + \frac{\sqrt{h}}{\sqrt{2}}[z\Lambda'^{-1}(M+S^*N) + z'^+ \Lambda'^{-1}(M+SN)],
\end{aligned}
\tag{5.23}
$$

где $\bar{x}$, $\bar{p}$ равны (1.10). Остается только подставить (5.23) в (5.21) и заменить z на $\frac{\partial}{\partial w^*}$, z^+ на w^*. Последнего, впрочем, можно и не делать, если для функционала Фока применять обозначения

$$
\Phi = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{s!}} c_{\alpha_1 \ldots \alpha_s} z^+_{\alpha_1} \cdots z^+_{\alpha_s} |0> \tag{5.24}
$$

и учитывать перестановочные соотношения

$$
z_\alpha z^+_\beta - z^+_\beta z_\alpha = \delta_{\alpha\beta} \tag{5.25}
$$

и условие нормировки вакуума $<0|0> = 1$.

Л и т е р а т у р а

1. В.А. Фок. Работы по квантовой теории поля. Изд. ЛГУ, 1957.
2. В.А. Фок. Квантовая физика и строение материи. Изд. ЛГУ, 1965.

Рукопись поступила в издательский отдел
15 марта 1967 г.