ЛЕКЦИИ
ДЛЯ МОЛОДЫХ
УЧЕНЫХ

И.А.Малкин, В.И.Манько

Инварианты, когерентные состояния и динамические симметрии квантовых систем

ДУБНА

ЛЕКЦИИ ДЛЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ

Выпуск 7

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Р2 - 9228

И.А.Малкин, В.И.Манько

ИНВАРИАНТЫ, КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СИММЕТРИИ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Дубна 1975

Введение

В настоящей лекции излагаются главным образом результаты работ /1–6/. Частично эти результаты излагались в обзоре /7/, а также в /8/. В лекции будут обсуждены вопросы симметрий уравнений, а также интегралов движения в квантовой механике, построены когерентные состояния произвольных квантовых систем, обсуждены динамические симметрии квантовых систем и алгебра, генерирующая состояния таких систем. Подробно будут обсуждены нестационарные и стационарные квадратичные квантовые системы с гамильтонианом в виде общей квадратичной формы от операторов координат и импульсов /включая линейные члены/. Для таких систем будут построены все интегралы движения, найдены динамическая симплектическая группа, функция Грина в явном виде, когерентные состояния и амплитуды переходов между фоковскими состояниями, происходящими под влиянием параметрического возбуждения. В качестве приложения развитых методов будут рассмотрены электронно-колебательные переходы в многоатомных молекулах, а также задача о взаимодействии электромагнитного поля с заряженной частицей.

1. Симметрия уравнений

Обсудим в настоящем разделе вопрос, что понимать под симметрией уравнений.

Пусть имеется функция $\phi(x_1 \ldots x_N)$. Она может быть конечно- или бесконечно-мерным столбцом. Рассмотрим соотношение

$$\hat{A}\phi = 0, \qquad /1/$$

где $\hat{A}$ для простоты будем считать линейным дифференциальным оператором, хотя для дальнейших рассуждений это несущественно /он может быть любым - интегральным, нелинейным и т.д. оператором/. Обычно под симметрией соотношения /1/ понимают совокупность таких преобразований координат и функций, которые образуют группу и не меняют вида соотношения /1/. Однако так понимаемая симметрия не объясняет вырождения уровней трехмерного осциллятора, волновые функции которого реализуют представления группы U_3. В этом случае под симметрией понимают совокупность операторов g_α, образующих алгебру Ли и удовлетворяющих соотношению

$$[\hat{A}, g_\alpha] = 0 \qquad /2/$$

/индекс α принимает конечное или бесконечное число значений/. Такое понятие о симметрии является более широким, оно включает в себя и предыдущее в качестве частного случая, причем допустимыми становятся преобразования операторов координат и импульсов типа $x' = \alpha x + \beta p$, , $p' = \gamma x + \delta p$. Однако, если мы хотим описать *все* решения соотношения /1/ на групповом языке, необходимо еще больше расширить понятие симметрии уравнений. А именно, будем называть операторами симметрии уравнения /1/ такие операторы f_α, которые удовлетворяют соотношению

$$[\hat{A}, f_\alpha]\phi = 0 , \qquad /3/$$

т.е. коммутируют с оператором $\hat{A}$ не тождественно, а на решениях уравнения /1/. Ясно, что предыдущие определения являются частными случаями данного определения. Таким образом, оператор f_α, названный оператором симметрии уравнения /1/, удовлетворяет главному условию - переводит *решение* ϕ_1 соотношения /1/ *в другое решение* $f_\alpha \phi_1 = \phi_2$. Операторы f_α могут образовывать алгебру Ли, а могут быть и другими объектами. Если они образуют алгебру Ли и существуют экспоненты от этих операторов, то можно построить группу Ли, группу

симметрии соотношения /1/, понимаемую в смысле определения /3/. Определение /3/ - очень широкое определение. На самом деле в физических задачах нет необходимости знать все операторы f_α. Нам достаточно найти такие операторы, чтобы в рамках найденной группы все физические величины, такие, как квантовые числа, амплитуды переходов, функция Грина, гамильтониан и т.д., имели групповой смысл. Если взять в качестве оператора $\hat{A}$ оператор $\hat{A} = i\hbar\partial/\partial t - H$, мы приходим к задаче об определении группы симметрии уравнения Шредингера, в случае $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial t} + H_{c\ell}(q,p)$ и $\hat{A} = \frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial}{\partial q}$ мы рассматриваем симметрию классической системы. Подобным образом можно рассматривать симметрию любых уравнений физики. Заметим, что еще имеется много физических систем /квантовых и классических/, для которых не исследован полностью вопрос об их симметрии как в смысле определения /2/, так и /3/. Определение группы симметрии уравнений /1/ было дано в /1/, а аналогичные определения для частных случаев соотношения /1/ содержатся в /9,10/.

2. *Инварианты /интегралы движения/*

Напомним в этом разделе свойство инвариантов или интегралов движения, а также обсудим вопрос, сколькими инвариантами может обладать квантовая система. Иногда в этом вопросе, который в общем известен, имеются разночтения и различная трактовка. Подойдем к этому вопросу с точки зрения связи классической и квантовой механик. Известно, что классическая динамическая система описывается уравнениями движения второго порядка. Если проводить описание на языке уравнений Гамильтона $\dot{q} = \partial H/\partial p$ и $\dot{p} = -\partial H/\partial q$, , $q = (q_1 \dots q_N)$, $p = (p_1 \dots p_N)$, то имеется система $2N$ / N - число степеней свободы системы/ уравнений первого порядка. Решение этой системы полностью определяется $2N$ постоянными. Эти константы могут быть выбраны как координаты начальной точки классической траектории в фазовом пространстве координат q и импульсов p. Таким образом, движение классической системы описывается зависимостью $q(t) = q(q_0, p_0, t)$; $p(t) = p(q_0, p_0, t)$. Если разрешить эти соотношения, выразив начальные точки q_0 и p_0 через величины q, p, t, то получается функция от траектории $q_0(q, p, t)$ и $p_0(q, p, t)$, постоянные на классической траектории. Таким образом, они являются интегралами движения, т.е. полная производная от этих функций, выраженная на языке скобок Пуассона, равна нулю. Перейдем теперь к обсуждению квантового случая. Поскольку имеется принцип соответствия классической и квантовой механик и поскольку классическая механика является предельным случаем квантовой механики, что прекрасно демонстрируется в фейнмановской формулировке квантовой механики с помощью интеграла по путям, для квантовой системы должно существовать $2N$ интегралов движения, отвечающих данным классическим интегралам. Как и в классической механике, любая функция от интегралов движения также сохраняется, т.е. является интегралом движения, так и в квантовом случае любая функция от сохраняющихся операторов сама является оператором-интегралом движения. Поэтому можно выбирать в качестве $2N$ интегралов движения операторы, отвечающие начальным точкам в фазовом пространстве классической системы. Остальные интегралы могут как-то выражаться через эти операторы. Например, в случае одномерного свободного движения с гамильтонианом $H = p^2/2m$ классическим инвариантам, начальным точкам $p_0 = p$ и $q_0 = q - pt/m$ отвечают интегралы движения в квантовом случае $p_0 = -i\hbar\partial/\partial x$ и $q_0 = x + i\hbar t\partial/\partial(mx)$.

Если у квантовой системы существует оператор эволюции U, то можно построить $2N$ интеграла движения q_0 и p_0 по следующей формуле:

$$q_0 = UxU^{-1}; \quad p_0 = -i\hbar U\frac{\partial}{\partial x}U^{-1}. \qquad /4/$$

3. *Инварианты и симметрия уравнения Шредингера*

Существует замечательная связь между операторами симметрии уравнения Шредингера f_α и интегралами движения. А именно, *инварианты квантовой системы одновременно являются операторами симметрии этой системы в смысле /3/*. Действительно, операторы симметрии I_α в смысле /3/ должны удовлетворять условию

$$[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H, I_\alpha]\Psi = 0, \qquad /5/$$

где Ψ - решения уравнения Шредингера. С другой стороны, интеграл движения определяется как оператор, среднее значение которого не зависит от времени

$$\frac{d}{dt}(\Psi, I_\alpha\Psi) = 0. \qquad /6/$$

Это означает, что

$$(\dot\Psi, I_\alpha\Psi) + (\Psi, \dot I_\alpha\Psi) + (\Psi, I_\alpha\dot\Psi) = 0$$

или

$$(-i\hbar H\Psi, I_\alpha\Psi) + (\Psi, \dot I_\alpha\Psi) + (\Psi, I_\alpha\frac{H}{i\hbar}\Psi) = 0$$

$$(\Psi, \{\frac{i}{\hbar}(H^+ I_\alpha - I_\alpha H) + \frac{\partial I_\alpha}{\partial t}\}\Psi) = 0. \qquad /7/$$

Если $H^+ = H$, то достаточным условием выполнения /7/ является условие, определяющее инвариант I_α

$$[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}H, I_\alpha]\Psi = 0, \qquad /8/$$

что эквивалентно /5/. Таким образом, *интеграл движения I_α /и любая функция от него/ переводит решение уравнения Шредингера в другое решение.*

Обычное определение интеграла движения в квантовой механике является частным случаем данного определения /8/.

полностью определяют эволюцию системы. Таким образом, физический смысл интеграла движения a заключается в том, что он определяет начальную точку траектории в фазовом пространстве средних координат и импульсов. Когерентные состояния строятся обычным образом как собственные состояния неэрмитовых операторов /см. [7] /

$$a_\mu |\vec{\alpha}\rangle = \alpha_\mu |\vec{\alpha}\rangle . \qquad /10/$$

Новым по сравнению с другими работами существенным моментом является тот факт, что мы строим когерентные состояния не с помощью какого-то произвольного оператора уничтожения a, а именно с помощью *интеграла движения*. Это существенно облегчает расчеты и позволяет легко строить когерентные состояния нестационарных систем, что было использовано в [2–6]. Вектор $\vec{\alpha}$ задается N произвольными комплексными числами. Для любой динамической системы существуют, таким образом, когерентные состояния /этот вывод справедлив, разумеется, и для динамических систем с координатами и импульсами, меняющимися в конечных пределах - это динамические системы типа квантового волчка, описываемого углами Эйлера/. Явный вид когерентных состояний для произвольных систем получить трудно, поскольку когерентное состояние, выбранное в начальный момент времени в виде квадратичной экспоненты, под действием оператора эволюции может сильно изменить свой функциональный вид. Лишь для систем, описываемых квадратичным гамильтонианом, для которых оператор эволюции сам представляет собой квадратичную экспоненту, функциональный вид когерентных состояний со временем не меняется, поскольку интеграл от произведения двух квадратичных экспонент сам является квадратичной экспонентой.

Для когерентных состояний произвольной квантовой системы выполняются стандартные соотношения ортогональности и полноты

$$\langle\vec{\alpha}|\vec{\beta}\rangle = \exp\left(-\frac{|\vec{\alpha}|^2}{2} - \frac{|\vec{\beta}|^2}{2} + \vec{\alpha}^*\vec{\beta}\right) \qquad /11/$$

$$\pi^{-N}\int |\vec{\alpha}\rangle\langle\vec{\alpha}|\, d^2\vec{\alpha} = 1 .$$

Операторы a_μ неэрмитовы, поэтому их собственные функции, принадлежащие разным собственным значениям, не обязательно ортогональны. Существование когерентных состояний для произвольных квантовых систем, обладающих оператором эволюции, дает возможность построить также фоковское представление для таких систем. Поскольку когерентное состояние $|\vec{\alpha}\rangle$ задает производящую функцию для состояний $|\vec{n}\rangle$, являющихся собственными состояниями квадратичных операторов $a_\mu^+ a_\mu$ /см. [17] /, легко построить эти состояния, дифференцируя функцию $e^{|\vec{\alpha}|^2/2}|\vec{\alpha}\rangle$ по переменным α. Тем самым показывается, что для любых гамильтонианов существует полный набор интегралов движения, чьи собственные числа совпадают с набором собственных чисел, задающих энергии N независимых гармонических осцилляторов. Система функций $|\vec{n}\rangle$ полна $\sum_{\vec{n}} |\vec{n}\rangle\langle\vec{n}| = 1$,

причем эти функции ортогональны, $\langle\vec{n}|\vec{m}\rangle = \delta_{\vec{n}\vec{m}}$. Явный вид функций $|\vec{n}\rangle$ легко получить в случае квадратичного гамильтониана, поскольку для него оператор эволюции /квадратичная экспонента/ сохраняет начальный функциональный вид состояния $|\vec{n}\,0\rangle$/полином Эрмита/. В случае же неквадратичного гамильтониана оператор эволюции таков, что изменяет функциональный вид начального состояния $|\vec{n}\rangle$.

Распределение вероятностей в когерентном состоянии по состояниям с заданными числами $|\vec{n}\rangle$ является распределением Пуассона

$$|\langle\vec{\alpha}|\vec{n}\rangle|^2 = \exp\left(-\frac{|\vec{\alpha}|^2}{2}\right)\prod_\mu \frac{|\alpha_\mu|^{2n_\mu}}{n_\mu!} . \qquad /12/$$

Возможность построения когерентных состояний $|\vec{\alpha}\rangle$ и состояний $|\vec{n}\rangle$ для произвольных квантовых систем связана с известным свойством изоморфизма гильбертовых пространств состояний. Благодаря этому свойству пространство состояний любой N-мерной квантовой системы можно отобразить на пространство состояний N-мерного гармонического осциллятора, что делает очевидным соответствие квантовых чисел последнего и квантовых чисел, задающих состояние любой системы. Обсудим теперь вопрос о связи когерентных состояний с фейнмановским интегралом по путям.

Поскольку когерентные состояния являются полной системой функций, функция Грина $G(2,1)$, являющаяся амплитудой вероятности перехода частицы, находящейся в точке 1 в момент времени t_1, в точку 2 в момент времени t_2, вычисляется по следующей формуле:

$$G(2,1) = \pi^{-N} \int d^{2}\vec{a}\, |\vec{a}, \vec{x}_2, t_2 \rangle \langle \vec{a}, \vec{x}_1, t_1| . \qquad /13/$$

Эта формула аналогична разложению функции Грина по любой полной системе функций, например, по функциям $|\vec{n}\rangle$:

$$G(2,1) = \sum_{\vec{n}} |\vec{n}, \vec{x}_2, t_2 \rangle \langle \vec{n}, \vec{x}_1, t_1| . \qquad /14/$$

Однако, если вспомнить физический смысл переменной $\vec{a}$, то формула для функции Грина с интегрированием по когерентным состояниям приобретает особый смысл. Фактически мы имеем выражение для функции Грина, представленное через интеграл по фазовому пространству начальных средних координат системы. Тем самым интеграл по траекториям Фейнмана всегда сводится к интегралу по начальным координатам траекторий в фазовом пространстве, причем переменных $\vec{a}$ как раз хватает для получения требуемого выражения. Это связано, в частности, с тем, что классическая система описывается уравнениями второго порядка. При квантовом описании с помощью интеграла по путям системы, описываемой на классическом языке уравнениями более высоких порядков, такого согласования, по-видимому, уже не будет. Заметим, что при вычислении амплитуды перехода из точки 1 в точку 2 как интеграла по траектории интервал времени t_1, t_2 разбивается на малые участки длины ϵ, а затем $\epsilon \to 0$ /18/. При этом на временном интервале ϵ траектория заменяется обычно либо отрезком прямой, либо кусочком классической траектории /т.е. кривыми, задаваемыми начальной координатой и скоростью/. Предел при $\epsilon \to 0$ при этом существует и дает функцию Грина. Из проведенного рассмотрения вытекает, что если соединять концы интервала ϵ кривыми, задаваемыми большим числом параметров, чем 2, предельная процедура уже не должна давать правильного значения функции Грина. Этот вопрос требует дополнительного рассмотрения.

Следует подчеркнуть, что в тех задачах, для которых получены явные выражения для функции Грина, легко построить и явный вид когерентных состояний. Это позволяет воспользоваться стандартными методами техники когерентных состояний, в частности, рассматривать задачу на языке P-распределения, введенного Глаубером /17/.

6. *Квадратичные системы*

Для примера подробнее рассмотрим теперь частный случай квантовой системы, которая описывается квадратичным гамильтонианом. Когерентные состояния такой системы построены Хольцем /18/ и в работах /3, 4б/. Подробно свойства когерентных состояний квадратичных систем, а также различные приложения к вычислению с их помощью магнитных свойств бозонных и фермионных газов заряженных частиц в электромагнитных полях изучены в работах /3, 4/. Изложение ведется согласно этим работам. Пусть гамильтониан системы имеет вид

$$H = \frac{1}{2}\vec{q}\, B(t)\, \vec{q} + \vec{C}(t)\, \vec{q} + \phi(t) . \qquad /15/$$

Здесь $2N$-мерный столбец $\vec{q}$ определен так: $\vec{q} = \begin{pmatrix} -ih\frac{\partial}{\partial \vec{x}} \\ \vec{x} \end{pmatrix}$.

Скалярное произведение $\vec{C}\vec{q}$ понимается как $\sum_{\alpha=1}^{2N} C_\alpha q_\alpha$ и $\vec{q}B\vec{q} = \sum_{\alpha,\beta=1}^{2N} q_\alpha B_{\alpha\beta} q_\beta$. Тогда $2N$ интеграла движения I_α имеют вид

$$I_\alpha = \sum_{\beta=1}^{2N} \Lambda_{\alpha\beta} q_\beta + \Delta_\alpha , \qquad /16/$$

где симплектическая матрица $\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 \\ \lambda_3 & \lambda_4 \end{pmatrix}$ удовлетворяет уравнению $\dot{\Lambda} = \Lambda\Sigma B$ и $\Lambda(0) = E$, а вектор $\dot{\vec{\Delta}} = \Lambda\Sigma\vec{C}$ $\Lambda(0) = 0$, причем матрица Σ имеет матричные элементы $\Sigma_{\alpha\beta} = [q_\alpha, q_\beta]$. Тогда интеграл движения, N-мерный вектор $\vec{a}$ имеет вид

$$\vec{a} = \frac{1}{\sqrt{2h}}\{\lambda_p(-ih\frac{\partial}{\partial\vec{x}}) + \lambda_q\vec{x}\}\;;\lambda_p = \lambda_3 + i\lambda_1\,,\ \lambda_q = \lambda_4 + i\lambda_2\,, \qquad /17/$$

где λ_p и λ_q - невырожденные $N\times N$-матрицы и $\lambda_p\lambda_q^+ - \lambda_q\lambda_p^+ = 2iE$. Все свойства матриц λ_i и λ_p, λ_q вытекают из условия симплектичности $\Lambda^{-1} = \Sigma\Lambda^T\Sigma$ действительной матрицы Λ. Это условие необходимо для сохранения коммутатора $[q_\alpha, q_\beta] = [I_\alpha, I_\beta]$. Для нахождения когерентного состояния $|\vec{\alpha}>$ сперва построим вакуум $|\vec{0}>$ такой, что $\vec{a}|\vec{0}> = 0$ и функция $|\vec{0}>$ удовлетворяет уравнению Шредингера. Нормированный вакуум имеет вид /4б/.

$$|\vec{0}> = (\pi h)^{-N/4}(\det\lambda_p)^{-1/2}\exp\{-\frac{i}{2h}\vec{x}\lambda_p^{-1}\lambda_q\vec{x} - \frac{i}{h}\vec{x}\lambda_p\vec{\delta} +$$

$$+\frac{1}{4h}\vec{\delta}\lambda_p^*\lambda_p^{-1}\vec{\delta} - \frac{1}{4h}|\vec{\delta}|^2 - \frac{i}{2h}\int_0^t \mathrm{Im}(\dot{\vec{\delta}}^*\vec{\delta})d\tau\} \qquad /17/$$

$$\delta_j = \Delta_{N+j} + i\Delta_j\,.$$

Когерентное состояние легко строится действием на вакуум интеграла движения, унитарного вейлевского оператора сдвига $|\vec{\alpha}> = D(\vec{\alpha})|\vec{0}> = \exp(\vec{\alpha}\vec{a}^+ - \vec{\alpha}^*\vec{a})\,|\,\vec{0}>$. Это сразу дает, что $|\vec{\alpha}>$ есть решение уравнения Шредингера. Его явный вид таков /4б/:

$$|\vec{\alpha}> = |\vec{0}>\exp\{\frac{1}{2}\vec{\alpha}\lambda_p^*\lambda_p^{-1}\vec{\alpha} - \frac{1}{2}|\vec{\alpha}|^2 +$$

$$+\frac{1}{\sqrt{2h}}\vec{\alpha}(\vec{\delta}^* - \lambda_p^*\lambda_p^{-1}\vec{\delta} + 2i\lambda_p^{T-1}\vec{x})\}. \qquad /18/$$

Фоковские состояния легко получить из /18/, используя определение полинома Эрмита нескольких переменных /20/:

$$\exp(-\frac{1}{2}\vec{\alpha}C\vec{\alpha} + \vec{x}\vec{\alpha}) = \sum_{n_1\ldots n_N=0}^{\infty}\frac{\alpha_1^{n_1}\ldots\alpha_N^{n_N}}{n_1!\ldots n_N!}H_{n_1\ldots n_N}(C^{-1}\vec{x})\,,$$

что дает нам формулу для фоковского состояния:

$$|\vec{n}> = \frac{\sqrt{n_1!\ldots n_N!}}{(2\pi i)^N}\oint\ldots\oint\frac{e^{|\vec{\alpha}|^2/2}|\vec{\alpha}>\,d\alpha_1\ldots d\alpha_N}{\alpha_1^{n_1+1}\ldots\alpha_N^{n_N+1}}$$

/здесь замкнутые контуры интегрирования в плоскостях комплексных переменных α_i охватывают начало координат/ в следующем виде:

$$|\vec{n}> = \frac{|\vec{0}>}{\sqrt{n_1!\ldots n_N!}}H_{n_1\ldots n_N}(C^{-1}\vec{u})\;;\ C = \frac{\lambda_p^*\lambda_p^{-1}}{2}\,, \qquad /19/$$

$$\vec{u} = (2h)^{-1/2}(\vec{\delta}^* - \lambda_p^*\lambda_p^{-1}\vec{\delta} + 2i\lambda_p^{T-1}\vec{x})\,.$$

Состояния /19/ ортогональны $<\vec{n}|\vec{m}> = \delta_{\vec{n}\vec{m}}$ и полны.

7. Инварианты и функция Грина

В работах /4б/ был выяснен еще один аспект интегралов движения /4/. Оказывается, что функция Грина является решением нового уравнения, определяемого инвариантами /4/. Так, из физического смысла функции Грина как амплитуды перехода из начальной точки в конечную и физического смысла интеграла движения $\hat{q}_0$ как оператора начальной координаты вытекает, что

$$\hat{q}_0(x)\,G(x,x_0,t) = x_0G(x,x_0,t)\,. \qquad /20а/$$

Это легко проверить, исходя из соотношений /4/ и того, что $G(x,x_0,t) = U\delta(x-x_0)$. Можно легко доказать справедливость еще одного соотношения, а именно

$$p_0(x)\,G(x,x_0,t) = ih\frac{\partial}{\partial x_0}G(x,x_0,t)\,, \qquad /20б/$$

а также соотношения

$$q(x_0)\,G(x,x_0,t) = xG(x,x_0,t)\,, \qquad /20в/$$

где $q(x) = U^T x U^{T-1}$ и $q_0(x_0)$ действует в /20в/ на переменную x. Соотношения /20а/, /20б/ или /20а/, /20в/ определяют функцию Грина с точностью до фазового множителя, зависящего от времени и определяемого из уравнения Шредингера. Часто оказывается, что решать систему уравнений /20/ гораздо легче, чем обычное уравнение для функции Грина, если конечно независимо известен явный вид всех интегралов движения, которые необходимо находить заранее. Описанный подход аналогичен тому, что в классической механике знание всех инвариантов эквивалентно нахождению решения уравнений движения или действия, как производящей функции канонического преобразования, задающего переход от начальных точек q_0, p_0 к текущим $q(t)$, $p(t)$. Так и в квантовой механике знание всех интегралов движения дает возможность определить эволюцию системы, т.е. найти функцию Грина. Легко решить систему /20/ в случае квадратичных систем. Функция Грина имеет в x-представлении вид /4б/:

$$G(x,x_0,t) = (2\pi i h)^{-N/2}(\det{-\lambda_3})^{-1/2}\exp\{-\frac{i}{2h}\vec{x}\lambda_3^{-1}\lambda_4\vec{x} +$$

$$+\frac{i}{h}\vec{x}\lambda_3^{-1}\vec{x}_0 - \frac{i}{2h}\vec{x}_0\lambda_1\lambda_3^{-1}\vec{x}_0 - \frac{i}{h}\vec{x}\lambda_3^{-1}\vec{\delta}_2 - \qquad /21/$$

$$-\frac{i}{h}\vec{x}_0(\vec{\delta}_1 - \lambda_1\lambda_3^{-1}\vec{\delta}_2) - \frac{i}{2h}\vec{\delta}_2\lambda_1\lambda_3^{-1}\vec{\delta}_2 + \frac{i}{h}\int_0^t \dot{\vec{\delta}}_1\vec{\delta}_2\,d\tau\,,$$

$$\vec{\Delta} = \begin{pmatrix}\vec{\delta}_1\\ \vec{\delta}_2\end{pmatrix};\quad \det\lambda_3 \neq 0\,.$$

Как показано в /4/, самым удобным оказывается выражение для функции Грина в представлении когерентных состояний, там также исследован вопрос о виде функции Грина в случае вырожденных систем /в частности, когда $\det\lambda_3 = 0$ /. Явное выражение для функции Грина квадратичных систем /эквивалентное, но менее удобное, чем

/21//, было получено в /3б/. Уравнение Шредингера для таких систем было решено впервые в /21/. Ядро симплектического преобразования /16/ с точностью до важного фазового множителя получено в /22–24/.

Интегралы движения /4/ позволяют также найти адиабатические инварианты квантовой системы. Так, зная точные инварианты /4/ и разлагая их в ряды по параметрам адиабатичности, можно получать адиабатические инварианты разных порядков. Можно сделать вывод, что число адиабатических инвариантов равно числу точных инвариантов, т.е. $2N$ для системы с N степенями свободы /см. /3б/ /.

8. Примеры квадратичных систем - многоатомная молекула

Развитый метод весьма удобен при рассмотрении тех физических задач, которые сводятся к решению уравнения типа уравнения Шредингера с квадратичным гамильтонианом. Такие задачи возникают в теории электронно-колебательных переходов молекул, в теории колебательных уровней энергии атомных ядер, в физике твердого тела и в физике элементарных частиц, например, в рамках осцилляторных моделей типа /25, 26/. Электронно-колебательные переходы в молекулах рассмотрены в /5/. В случае этих переходов происходит следующее. В начальный момент ядра атомов в молекуле описываются в приближении Борна-Оппенгеймера гармоническим гамильтонианом, который в нормальных координатах имеет вид

$$H_{in} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{m_i\omega_i^2 x_i^2}{2}\,. \qquad /22/$$

Это частный вид гамильтониана /15/ с диагональной матрицей B и $\vec{C} = 0$, $\phi = 0$. Затем мгновенно происходит электронный переход, что сказывается на виде гамильтониана. Он становится, вообще говоря, таким:

$$H_f = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i,k} x_i U_{ik} x_k + \sum_i C_i x_i\,. \qquad /23/$$

Данный процесс означает, что матрицы $B(t)$ и $\vec{C}(t)$ в /15/ так зависят от времени, что до перехода дают выражение /22/, а после перехода - выражение /23/. Этот переход, как показано в /3б,5/, осуществляется с помощью канонического преобразования, причем для случая электронно-колебательного перехода в молекуле с помощью преобразования частного вида, поскольку кинетическая энергия не меняется. В каноническом преобразовании - с помощью симплектической матрицы Λ матрицы $\lambda_2=\lambda_3=0$. Относительные интенсивности электронно-колебательных переходов определяются факторами Франка-Кондона, интегралами перекрытия волновых функций, описывающих энергетические состояния начального H_{in} и конечного H_f гамильтонианов. В принципе можно расширить границы применимости гармонического приближения на случаи не слишком быстрых электронных переходов, когда ширина электронного перехода Γ_ℓ сравнима или не намного меньше, чем ширина колебательного перехода Γ_v. Обычно выполняется сильное неравенство, т.е. электронный переход происходит мгновенно, когда положение ядер еще не изменилось. Интегралы перекрытия для данной задачи являются частным случаем амплитуд переходов под влиянием параметрического возбуждения квадратичной системы, полученных в /3б/ и выражающихся через полиномы Эрмита от нескольких переменных. Это позволяет воспользоваться известными свойствами полиномов Эрмита, а также вывести новые рекуррентные соотношения и правила сумм для интенсивностей переходов /см. /5/ /. Рассмотренный случай молекул SO_2, BS_2, $ZnT\ell_2$ дает хорошее согласие теоретических и экспериментальных данных. Из возможных приложений рассмотренной задачи можно также отметить задачу об излучении нестационарной квадратичной квантовой системы общего вида /см. /6/ /, а также задачу о построении спектра квазиэнергий квадратичной системы с периодическим по времени гамильтонианом /см. /27/ /. Можно также, зная ядро симплектического преобразования, легко получить формулы сложения полиномов Эрмита нескольких переменных и любых других функций, которые можно связать с представлением симплектической группы.

Литература

1. *И.А.Малкин, В.И.Манько. Письма ЖЭТФ 2, 230 /1965/; ЯФ 9, 184 /1969/; 3, 372 /1966/; 8, 1264 /1968/.*
2. *И.А.Малкин, В.И.Манько. а/ ЖЭТФ 55, 1014 /1968/; 59, 1746 /1970/; ТМФ 6, 71 /1971/; Phys.Lett., 32A, 243 (1970); ДАН 188, 321 /1969/; б/ препринт ФИАН №15 /1971/.*
3. *И.А.Малкин, В.И.Манько, Д.А.Трифонов. а/ ЖЭТФ 58, 721 /1970/; Phys.Rev., 2D, 1371 (1970); Phys.Rev., 30A, 414 (1969); Nuovo Cimento, 4A, 773 (1971); б/ Краткие сообщения по физике №5, стр. 20, 27 /1971/; J.Math.Phys., 14, 576 (1973).*
4. *В.В.Додонов, И.А.Малкин, В.И.Манько. а)Physica,59,241 (1972);72,597 (1974);Phys.Lett., 39A, 377 (1972); Nuovo Cimento, 24B, 46 (1974); б/ препринт ФИАН №106 /1974/; Краткие сообщения по физике №1 /1975/.*
5. *Е.В.Докторов, И.А.Малкин, В.И.Манько. Краткие сообщения по физике №12 /1974/; препринт ФИАН №14, №142 /1974/.*
6. *Е.В.Иванова, И.А.Малкин, В.И.Манько. Phys.Lett., 50A, 23 (1974).*
7. *Е.Б.Аронсон, И.А.Малкин, В.И.Манько. ЭЧАЯ 3, 123 /1974/.*
8. *В.И.Манько. Вводная статья в сборнике "Когерентные состояния в квантовой теории", М., Мир, 1975 ; Invited Talk in Proc. 2nd Intern. Colloq. on Group Theoretical Methods in Physics, vol. 1, A107 (1973), Netherlands.*
9. *Y.Dothan. Phys.Rev., 2D, 2944 (1970).*
10. *R.L.Anderson, S.Kumei, C.E.Wulfman. Phys.Rev. Lett., 28, 988 (1972).*
11. *A.O.Barut.Phys.Rev., 135, 839 (1964).*
12. *N.Mukunda, L.O.'Raifeartaigh, E.C.G.Sufarshan. Phys.Rev.Lett., 19, 332 (1965).*
13. *Y.Dothan, M.Gell-Mann, Y.Ne'eman. Phys.Rev. Lett., 17, 148 (1965).*
14. *A.O.Barut, H.Kleinert. Phys.Rev., 156, 1541; 157, 1130 (1967).*
15. *Y.Nambu. Phys.Rev., 160, 1171 (1967).*
16. *C.Fronsdal. Phys.Rev., 156, 1653 (1967); 171, 1811 (1968).*
17. *R.J.Glauber. Phys.Rev.Lett., 10, 84 (1963).*

18. Р.П.Фейнман, А.Хибс. "Квантовая механика и интегралы по траекториям", М., Мир, 1968.
19. A.Holz. Lett.Nuovo Cim., 4, 1319 (1970).
20. Г.Бейтмен, А.Эрдейи. "Высшие трансцендентные функции", т.2, М., Наука, 1966.
21. Н.А.Черников. ЖЭТФ 53, 1006 /1967/.
22. Ф.А.Березин. "Метод вторичного квантования", М., 1965.
23. M.H.Boon, T.H.Seligman. J.Math.Phys., 14, 1224 (1973).
24. T.Haskell, B.G.Wybourne. Proc. Royal Soc., 334A, 541 (1973).
25. М.А.Марков. ДАН СССР 101, 51 /1955/.
26. В.Л.Гинзбург, В.И.Манько. Nucl.Phys., 74, 577 (1965).
27. И.А.Малкин, В.И.Манько, А.П.Шустов. Препринт ФИАН, 1975.

Рукопись поступила в издательский отдел 17 октября 1975 года.