Краткие сообщения по физике № 1 1976

О НОРМАЛЬНЫХ КООРДИНАТАХ В ФАЗОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

В. В. Додонов, И. А. Малкин, В. И. Манько

УДК 530.145

Обсуждена новая симметрия уравнений для функции Грина квантовой системы, введенных в /I/. Рассмотрен аналог нормальных координат в фазовом пространстве такой системы.

В работах /I/ были построены новые уравнения для функции Грина /Ф.Г./ произвольной квантовой системы $G(\vec{x},\vec{x}',t)$; $\vec{x} = (x_1,x_2,\ldots x_n)$, где n – число степеней свободы, и показано, что она является собственной функцией интегралов движения $\hat{\vec{x}}_0$, имеющих смысл операторов начальной точки траектории системы. Для одномерного осциллятора и заряда в электромагнитных полях аналогичные уравнения были использованы также в /2/. Цель настоящей работы состоит в исследовании свойств симметрии квантовой системы не на основе уравнения Шредингера для волновой функции, зависящей от n переменных $x_1, x_2,\ldots x_n$, а на основе системы уравнений для функции Грина $G(\vec{x},\vec{x}',t)$, зависящей от $2n$ переменных $(\vec{x},\vec{x}')$. Мы применим также эти уравнения для введения аналога нормальных координат для квантовых систем.

Сущность подхода заключается в том, что при рассмотрении уравнений для функции Грина становятся допустимыми замены переменных в $2n$-мерном пространстве $(\vec{x},\vec{x}')$, а не в пространстве n измерений, что позволяет вводить более общие преобразования, чем при рассмотрении уравнения Шредингера для волновой функции. Эти преобразования, очевидно, включают в себя как частный случай все канонические преобразования в фазовом пространстве системы $(\vec{x},\vec{p})$. Для доказательства этого достаточно построить преобразование Фурье $G(\vec{x},\vec{p},t)$ функции Грина $G(\vec{x},\vec{x}',t)$ по переменной $\vec{x}'$.

Уравнения для функции Грина, введенные в /I/, имеют вид

$$\left\{\hat{\vec{Q}}(\vec{x},\partial/\partial\vec{x}) - \hat{\vec{Q}}'(\vec{x}',\partial/\partial\vec{x}')\right\}G(\vec{x},\vec{x}',t) = 0, \qquad (I)$$

(здесь $\hbar = 1$), где $2n$-мерный операторный вектор $\hat{\vec{Q}}$ является интегралом движения, имеющим смысл оператора начальных координат в фазовом пространстве:

$$\hat{\vec{Q}} = \begin{pmatrix} \hat{\vec{P}} \\ \hat{\vec{X}} \end{pmatrix} = \hat{U}\hat{\vec{q}}\hat{U}^{-1}; \quad \hat{\vec{q}} = \begin{pmatrix} -i\partial/\partial\vec{x} \\ \hat{\vec{x}} \end{pmatrix}, \tag{2}$$

а $2n$-мерный вектор $\hat{\vec{Q}}'$ равен $(i\partial/\partial\vec{x}', \hat{\vec{x}}')$; $\hat{U}$ - оператор эволюции квантовой системы (функция Грина есть ядро этого оператора в соответствующем представлении).

Под симметрией квантовой системы будем понимать теперь симметрию уравнения (I) в смысле определения /3/, т.е. существование системы операторов $\hat{B}_i$, удовлетворяющих условию

$$(\hat{\vec{Q}} - \hat{\vec{Q}}')\hat{B}_i G = 0 \tag{3}$$

на классе функций G, удовлетворяющих уравнению /I/. Такой подход позволяет существенно расширить количество операторов симметрии квантовой системы по сравнению с количеством операторов симметрии уравнения для волновой функции $\psi(\vec{x},t)$. В частности, можно рассматривать все канонические преобразования типа $G'(\vec{x},\vec{x}') = \hat{S}G(\vec{x},\vec{x}')$, что эквивалентно переходу к новым операторам: $\hat{\vec{x}} \to \hat{S}^{-1}\hat{\vec{x}}\hat{S}$; $\hat{\vec{x}}' = \hat{S}^{-1}\hat{\vec{x}}\,\hat{S}$; $\partial/\partial\vec{x} \to \hat{S}^{-1}\partial/\partial\vec{x}\hat{S}$; $\partial/\partial\vec{x}' \to \hat{S}^{-1}\partial/\partial\vec{x}'\hat{S}$, где ядро оператора $\hat{S}$ зависит уже от $4n$ переменных. Далее будем рассматривать еще более частный случай преобразований $\hat{B}_i$, сводящийся к чистой замене переменных

$$\vec{y} = \vec{y}(\vec{x},\vec{x}',t); \quad \vec{y}' = \vec{y}'(\vec{x},\vec{x}',t). \tag{4}$$

Под обобщенными нормальными координатами квантовой системы будем понимать такие переменные $\vec{y}', \vec{y}$, для которых ф.Г. может быть представлена в виде произведения n функций $G_k(y_k, y_k', t)$, каждая из которых зависит только от двух переменных y_k и y_k'; $k = 1,2,\ldots n$. Существование таких координат означает возможность "расщепления" весьма сложной в общем случае системы интегро-дифференциальных уравнений (I).

Покажем, что обобщенные нормальные координаты всегда существуют для системы с произвольным квадратичным гамильтонианом вида

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\,\hat{\vec{q}}B(t)\hat{\vec{q}} + \vec{C}(t)\hat{\vec{q}} + \Phi(t). \tag{5}$$

Согласно /I/, ф.Г. такой системы имеет вид (очевидно, достаточно ограничиться случаем $\vec{C} = \Phi = 0$):

$$G(\vec{x},\vec{x}',t) = \left[\det(-2\pi i\lambda_3)\right]^{-1/2} \times$$

$$\times \exp\left\{-\frac{i}{2}\left(\vec{x}\lambda_3^{-1}\lambda_4\vec{x} - 2\vec{x}\lambda_3^{-1}\vec{x}' + \vec{x}'\lambda_1\lambda_3^{-1}\vec{x}'\right)\right\}, \qquad (6)$$

где n-мерные матрицы λ_j, $j = 1,2,3,4$, являются элементами некоторой блочной симплектической матрицы. Для простоты мы ограничиваемся здесь случаем $\det\lambda_3 \neq 0$. Но в 2n-мерном пространстве векторов $\vec{z} = (\vec{x},\vec{x}')$ всегда существует такое ортогональное преобразование O ($\vec{z}' = O\vec{z}$), которое диагонализует квадратичную форму в аргументе экспоненты в (6). Новые переменные $\vec{z}'$ и являются обобщенными нормальными координатами. В этих переменных ф.Г. распадается даже на произведение 2n функций, каждая из которых зависит только от одного аргумента. Это означает, что с помощью преобразований (4) можно всегда полностью "расцепить" систему уравнений (I) для квадратичных систем. Заметим, что если рассматривать ф.Г. в переменных $(\vec{x},\vec{p})$, т.е. проделать Фурье-преобразование по переменной $\vec{x}$, то преобразование, факторизующее ф.Г., хотя и является ортогональным в пространстве $(\vec{x},\vec{p})$, но не является в общем случае каноническим, т.е. не сохраняет коммутаторы $[\hat{x}_j,\hat{p}_k]$. Это утверждение следует из результатов работы /4/ (см. также /5/). В качестве примера укажем на гамильтониан $\hat{H} = \hat{p}_x^2 + \hat{x}\hat{y}$. Достаточным условием возможности диагонализации гамильтониана (5) и факторизации функции Грина с помощью канонического преобразования является неотрицательная определенность матрицы в /6/. Если в системе можно ввести обычные нормальные координаты /5/, то вновь введенные обобщенные координаты, очевидно, могут быть сведены к обычным.

Проведенное рассмотрение показывает, что свойства симметрии квантовых систем, обсуждаемые на языке уравнений (I), богаче, чем обсуждаемые на языке уравнения Шредингера. Подробное рассмотрение частных примеров и связи уравнений (I) с адиабатическими инвариантами будет сделано в другой работе.

Авторы благодарны М. А. Маркову и Е. С. Фрадкину за полезные обсуждения.

Поступила в редакцию
6 августа 1975 г.

Литература

1. В. В. Додонов, И. А. Малкин, В. И. Манько. Краткие сообщения по физике ФИАН, № 1, 22 (1975); ТМФ, 24, 164 (1975).
2. L. F. Landovitz. Phys. Rev., A 11, 67 (1975).
3. И. А. Малкин, В. И. Манько. Письма ЖЭТФ, 2, 230 (1965).
4. J. Williamson. Amer. J. of Math., 58, 141 (1936).
5. В. И. Арнольд. Математические методы классической механики, приложение IX, М., "Наука", 1974 г.
6. U. M. Titulaer. Physica, 70, 257 (1973).