Краткие сообщения по физике №1 1975

КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ И СТАТИСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАДРАТИЧНЫХ СИСТЕМ

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

УДК 530.145

Показано, что запаздывающая функция Грина квантовой системы есть собственная функция операторов-интегралов движения. Явно найдена матрица плотности произвольной квадратичной системы и введены нормальные координаты в ее фазовом пространстве.

В работах /1,2/ методом когерентных состояний была построена в явном виде функция Грина квантовой системы с произвольным нестационарным гамильтонианом - квадратичной формой общего вида (с линейными членами) по операторам координат и импульсов. Известно /3/, что функция Грина позволяет получить статистическую сумму и, следовательно, все термодинамические свойства ансамбля рассматриваемых систем. (Переход от статистики Максвелла к ферми- и бозе-статистикам легко сделать, следуя работе /4/). Цель настоящей работы - получить методом когерентных состояний статистические свойства общеквадратичных систем, в частности, обобщить теорему Блоха /5/ на многомерную систему, а также вычислить точно матрицу плотности такой системы. Мы обсудим также квазиклассический предел выражения для матрицы плотности произвольной квантовой системы. Заметим, что в недавних работах /6,7/ обсуждались статистические свойства частных квадратичных систем. Применяемый нами метод близок, по-существу, методу канонических линейных преобразований, интенсивно развиваемому в настоящее время (см., например, работы /8/ и /2/ и ссылки в них).

Гамильтониан самой общей квадратичной системы с N степенями свободы можно представить в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{\vec{q}}B\hat{\vec{q}} + \vec{C}\hat{\vec{q}} + \Phi, \quad \vec{q} = (\vec{p}, \vec{x}), \quad \vec{C} = (\vec{c}_1, \vec{c}_2),$$
$$B = \begin{Vmatrix} b_1 & b_2 \\ b_3 & b_4 \end{Vmatrix}, \quad \vec{x} = (x_1, \dots x_N), \quad \vec{p} = (p_1, \dots p_N), \tag{I}$$

где x_k и p_k являются обобщенными координатами и импульсами, соответственно, а $2N$-мерный вектор $\vec{C}$ и $2N\times 2N$ матрица B могут быть произвольными достаточно гладкими функциями времени. Матрицу B всегда можно считать симметричной. Функция Грина произвольной квантовой системы может быть легко построена, если известны интегралы движения системы, под которыми мы понимаем такие операторы $\hat{I}$, которые любое решение уравнения Шредингера переводят снова в решение того же уравнения. Нетрудно убедиться, что операторы $\hat{\vec{X}} = \hat{U}\hat{\vec{x}}\hat{U}^{-1}$ и $\hat{\vec{P}} = \hat{U}\hat{\vec{p}}\hat{U}^{-1}$, где $\hat{U}$ – оператор эволюции (ядром которого является функция Грина), являются интегралами движения; с их помощью строятся когерентные состояния /I,2/, и из физического смысла этих интегралов как операторов начальных координат траектории системы в фазовом пространстве вытекают следующие уравнения для функции Грина /2/ (ср. с /8/):

$$\begin{aligned} \hat{\vec{X}}G(\vec{x}_2,\vec{x}_1;t) &= \vec{x}_1 G(\vec{x}_2,\vec{x}_1;t), \\ \hat{\vec{P}}G(\vec{x}_2,\vec{x}_1;t) &= i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{x}_1} G(\vec{x}_2,\vec{x}_1;t). \end{aligned} \tag{2}$$

Переменная $\vec{x}_1$ в левой части этих уравнений считается параметром.

Для квадратичных систем интегралы движения $\hat{\vec{X}}$ и $\hat{\vec{P}}$ линейно выражаются через операторы $\hat{\vec{x}}$ и $\hat{\vec{p}}$ с помощью симплектической матрицы $\Lambda = \tilde{T}\exp(\Sigma B(t))$:

$$\begin{gathered} \begin{pmatrix} \hat{\vec{P}} \\ \hat{\vec{X}} \end{pmatrix} = \Lambda \begin{pmatrix} \hat{\vec{p}} \\ \hat{\vec{x}} \end{pmatrix} + \vec{\Delta}, \quad \vec{\Delta} \equiv \begin{pmatrix} \vec{\delta}_1 \\ \vec{\delta}_2 \end{pmatrix} = \int_0^t \Lambda\Sigma\vec{C}\,d\tau, \\ \Sigma = \begin{pmatrix} 0 & E_N \\ -E_N & 0 \end{pmatrix}, \qquad \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 \\ \lambda_3 & \lambda_4 \end{pmatrix}, \qquad \Lambda\Sigma\tilde{\Lambda} = \Sigma . \end{gathered} \tag{3}$$

Поэтому функция Грина является экспонентой от квадратичной формы вида /2/

$$\begin{aligned} G(\vec{x}_2,\vec{x}_1;t) = (2\pi i\hbar)^{-N/2}\left[\det(-\lambda_3)\right]^{-1/2} \exp\Big\{ -\frac{i}{2\hbar}\Big[\vec{x}_2\lambda_3^{-1}\lambda_4\vec{x}_2 - \\ - 2\vec{x}_2\lambda_3^{-1}\vec{x}_1 + \vec{x}_1\lambda_1\lambda_3^{-1}\vec{x}_1 + 2\vec{x}_2\lambda_3^{-1}\vec{\delta}_2 + 2\vec{x}_1(\vec{\delta}_1 - \lambda_1\lambda_3^{-1}\vec{\delta}_2) + \\ + \vec{\delta}_2\lambda_1\lambda_3^{-1}\vec{\delta}_2 - 2\int_0^t (\dot{\vec{\delta}}_1\vec{\delta}_2 - \Phi)\,d\tau\Big]\Big\}, \quad \det\lambda_3 \neq 0. \end{aligned} \tag{4}$$

Чтобы получить равновесную матрицу плотности для гамильтонианов, не зависящих от времени, следует, согласно /3/, сделать в формуле (4) подстановку $t = -i\beta\hbar$, где $\beta = (\kappa T)^{-1}$, T - абсолютная температура. Определенная таким образом величина $G(\bar{x}_2, \bar{x}_1; \beta)$ и будет матрицей плотности, т.е. ядром статистического оператора $\hat{U}(\beta) = \exp(-\beta\hat{H})$. Следовательно, характеристическая функция /9/ любого линейного по координатам и импульсам оператора $\hat{\bar{A}}$ также является экспонентой от квадратичной формы

$$\chi(\bar{\xi}; \hat{\bar{A}}) = \langle \exp(i\bar{\xi}\hat{\bar{A}}) \rangle = sp\left[\hat{U}(\beta)\exp(i\bar{\xi}\hat{\bar{A}})\right]\left[sp\hat{U}(\beta)\right]^{-1} =$$

$$= \exp(-h_{ik}\xi_i\xi_k + i\bar{\xi}\bar{I}), \qquad (5)$$

$$\bar{I} = \langle \hat{\bar{A}} \rangle, \qquad h_{ik} = \frac{1}{2}\left[\langle \hat{A}_i\hat{A}_k \rangle - \langle \hat{A}_i \rangle\langle \hat{A}_k \rangle\right].$$

Характеристическая функция является производящей функцией для моментов операторов $\hat{A}_j$, поэтому все эти моменты могут быть выражены, согласно (5), через полиномы Эрмита от N переменных: $\left\langle \hat{A}_1^{n_1}\hat{A}_2^{n_2}\ldots\hat{A}_N^{n_N} \right\rangle = H_{\bar{n}}\left(-\frac{1}{2}h^{-1}\bar{I}\right)$; $\bar{n} = (n_1, n_2, \ldots n_N)$, причем матрица C, определяющая эти полиномы /10/, равна $C = -2h$ (операторы $\hat{A}_j$ для простоты считаются коммутирующими).

С другой стороны, обратное преобразование Фурье от характеристической функции по параметру $\bar{\xi}$ дает плотность вероятности распределения собственных значений оператора $\hat{\bar{A}}$, и так как преобразование Фурье от квадратичной экспоненты снова является квадратичной экспонентой, то тем самым доказана обобщенная теорема Блоха /5/: если система описывается квадратичным гамильтонианом, и движение этой системы в координатном пространстве финитно, то в состоянии теплового равновесия распределение собственных значений любой вещественной линейной комбинации операторов координат и импульсов является гауссовым. Требование финитности движения имеет ясный физический смысл и обеспечивает сходимость интегралов.

Заметим, что в стационарном случае задача о произвольном квадратичном гамильтониане может быть сведена к рассмотрению N одномерных задач путем некоторого симплектического преобразования в фазовом пространстве. То, что это может быть сделано, видно из следующих простых рассуждений. Симметричная вещественная (мы для простоты рассматриваем эрмитовы гамильтонианы, хотя это и не принципиально) матрица B может быть ортогональным преобразованием приведена к диагональному виду. Но ортогональная вещественная матрица размерности $2N \times 2N$ имеет $2N^2 - N$ независимых параметров, а симплектическая матрица имеет, как легко подсчитать, $2N^2 + N$ параметров, следовательно, осуществить требуемое преобразование симплектической матрицей еще проще. Поэтому в стационарном случае задача сводится к подробному исследованию одномерных гамильтонианов типа $\hat{H}_1 = a\hat{p}^2 + b\hat{x}^2 + c\hat{p} + d\hat{x}$. Здесь может быть семь различных случаев, в зависимости от того, какие из коэффициентов обращаются в нуль. Теорема Блоха справедлива при условии, что в указанной канонической форме все коэффициенты a и b положительны.

Метод нахождения функции Грина с помощью уравнений (2) очень удобен для вычисления квазиклассического приближения к матрице плотности, поскольку в стационарном случае интегралы движения могут быть легко представлены в виде ряда по степеням t с помощью формулы Хаусдорфа: $\exp(-i\hat{H}t/\hbar)\hat{x}\exp(i\hat{H}t/\hbar) = \hat{x} + \frac{t}{i\hbar}[\hat{H},\hat{x}] + \frac{1}{2!}\left(\frac{t}{i\hbar}\right)^2[\hat{H},[\hat{H},\hat{x}]] + \ldots$ Следовательно, подставляя $t = -i\beta\hbar$, можно получить разложение матрицы плотности по степеням постоянной Планка.

Что касается неравновесных квадратичных систем, то их рассмотрение может быть проведено по следующей схеме. Будем рассматривать исследуемую систему как часть некоторой большой системы (термостата), причем гамильтониан термостата и гамильтониан взаимодействия будем считать квадратичными. Эволюция расширенной системы описывается формулой Грина (4). Тогда, взяв в качестве начального состояния равновесное состояние расширенной системы, можно получить неравновесную матрицу плотности рассматриваемой малой системы в произвольно меняющихся во времени полях, просто проинтегрировав полную матрицу плотности по переменным термостата. Все интегралы являются гауссовыми, поэтому задача может быть решена точно. Частный случай общих квадратичных неравновесных систем - осциллятор в гармонической решетке и в однородном внешнем поле - был рассмотрен таким методом в работе /7/.

Статистическая сумма (а следовательно, и все термодинамические свойства) может быть вычислена наиболее просто в случае статистики Максвелла-Больцмана: достаточно в формуле (4) положить $\bar{x}_1 = \bar{x}_2$ и проинтегрировать по всему пространству. Случай статистик Ферми и Бозе ненамного сложнее, так как термодинамические потенциалы в случае этих статистик выражаются через больцмановскую стат-сумму с помощью обратного преобразования Лапласа /4/. На этой основе в работе /2/ были изучены свойства вырожденного Ферми- и Бозе-газов в однородных электромагнитных полях.

Поступила в редакцию
24 ноября 1974 года.

Литература

1. И. А. Малкин, В. И. Манько, Д. А. Трифонов. Краткие сообщения по физике ФИАН, № 5, 20, 27 (1971); J. Math. Phys., 14, 576 (1973).
2. В. В. Додонов, И. А. Малкин, В. И. Манько. Препринт ФИАН № 106, 1974 г.
3. D. ter Haar. Elements of statistical mechanics (Holt, Rinehart and Winston, N.Y., 1961).
4. Ю. Б. Румер. ЖЭТФ, 18, 1081 (1948).
5. F. Bloch. Zs. Physik, 74, 295 (1932).
6. U. M. Titulaer. Physica, 70, 257, 276, 456 (1973).
7. G. J. Papadopoulos. Physica, 74, 529 (1974).
8. P. Kramer, M. Moshinsky, T. H. Seligman. "Complex extensions of canonical transformations and quantum mechanics", published in "Group theory and its applications", vol. III, editor E. M. Loebl (Academic Press), 1974.
9. W. H. Louisell. "Radiation and noise in quantum electronics", McGraw-Hill, N.Y., (1964).
10. Г. Бейтмен, А. Эрдейи. Высшие трансцендентные функции, том 2, М., "Наука", 1966 г.