

И.А. Малкин, В.И. Манько

Динамические симметрии
и когерентные состояния
квантовых систем

И.А. Малкин, В.И. Манько

Динамические симметрии
и когерентные состояния
квантовых систем

И.А.Малкин, В.И.Манько

ДИНАМИЧЕСКИЕ СИММЕТРИИ И КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

В книге изложено современное состояние теории динамических симметрии и метода когерентных состояний — новых направлений в теоретической физике, развившихся за последнее десятилетие в связи с проблемами квантовой оптики, сверхтекучести, теории магнетизма и фундаментальными вопросами квантовой механики. Симметрии и когерентные состояния строятся на основе единого подхода, использующего наличие у произвольной N -мерной динамической системы $2N$ интегралов движения, отвечающих начальной точке траектории в фазовом пространстве системы. Динамические симметрии рассмотрены как для релятивистских систем, описываемых с помощью релятивистских уравнений с внутренними переменными, так и для квантовомеханических систем, описываемых уравнениями Шредингера и Дирака. Методами теории представлений динамической симплектической группы и когерентных состояний подробно рассмотрены свойства нестационарных систем, описываемых гамильтонианом, являющимся произвольной квадратичной формой операторов координат и импульсов. Разобраны важные частные случаи таких систем, например, построен спектр квазиэнергий в случае периодической зависимости гамильтониана от времени, а также изучено движение и излучение заряда во внешних нестационарных электрическом и магнитном полях.

Содержание

Предисловие	6
Глава I. Динамические симметрии нерелятивистских систем	9
§ 1. Введение	9
§ 2. Динамические системы, функция Грина и матрица плотности	13
§ 3. Симметрия уравнений	17
§ 4. Динамическая симметрия квантового осциллятора	19
§ 5. Динамическая симметрия ротатора	20
§ 6. Симметрия атома водорода	22
§ 7. Динамическая симметрия для нерелятивистской частицы в магнитном поле	26
§ 8. Симметрия кулоновского потенциала в га-мерном пространстве	31
§ 9. Когерентные состояния одномерного квантового осциллятора	32
Глава II. Когерентные состояния и точные решения для простых нестационарных квантовых систем	37
§ 1. Когерентные состояния осциллятора с зависящей от времени частотой	37
§ 2. Амплитуды перехода в нестационарном осцилляторе	43
§ 3. Когерентные состояния заряда в однородном переменном магнитном поле с векторным потенциалом $A=[H(t), r/2]$	46
§ 4. Амплитуды переходов между уровнями Ландау	53
§ 5. Когерентные состояния и возбуждение электрическим полем заряженной частицы в постоянном магнитном поле	59
§ 6. Когерентные состояния и функция Грина осциллятора с переменной	64

частотой в произвольно направленных, переменных, однородных электрическом и магнитном полях соленоида

Глава III. Инварианты и функция Грина динамических систем	72
§ 1. Инварианты (интегралы движения)	72
§ 2. Инварианты и динамическая симметрия уравнения Шредингера	75
§ 3. Когерентные состояния произвольных квантовых систем	77
§ 4. Когерентные состояния систем с квадратичным гамильтонианом	83
§ 5. Инварианты и функция Грина	87
§ 6. Неквадратичная система — сингулярный нестационарный осциллятор	99
§ 7. О нормальных координатах в фазовом пространстве квантовых систем	111
Глава IV. Матрица плотности квантовых систем	114
§ 1. Интегралы движения и матрица плотности	114
§ 2. Функции Грина стационарного уравнения Шредингера квадратичных квантовых систем	116
§ 3. Соотношение неопределенности энергия — время для нестационарных квантовых систем	122
§ 4. Линейные адиабатические инварианты и когерентные состояния	129
Глава V. Спектр квазиэнергий квадратичных систем	137
§ 1. Квазиэнергия и квазиэнергетические состояния квантовых систем с периодически изменяющимися параметрами	137
§ 2. Интегралы движения системы с периодическим квадратичным гамильтонианом	140
§ 3. Линейное каноническое преобразование	143
§ 4. Дискретный спектр квазиэнергий и когерентные состояния	146
§ 5. Непрерывный спектр квазиэнергий	150
§ 6. Смешанный спектр квазиэнергий	153
§ 7. Динамическая симметрия квазиэнергетических состояний	157
§ 8. Заряженная частица в периодическом поле	159
Глава VI. Излучение квадратичных систем	164
§ 1. Излучение нестационарной системы	164
§ 2. Излучение заряженной частицы в стационарных скрещенных полях	167
§ 3. Когерентные состояния заряженной частицы в полях волноводного типа	174
§ 4. Излучение заряда в полях волноводного типа	180
§ 5. Излучение заряженной частицы, находящейся в периодическом, зависящем от времени внешнем поле	183
Глава VII. Динамическая симметрия вибронных переходов многоатомной молекулы	188
§ 1. Введение	188
§ 2. Вибронные переходы многоатомной молекулы в гармоническом приближении	192
§ 3. Динамическая симметрия	194
§ 4. Интегралы перекрытия и рекуррентные соотношения	197
§ 5. Итеративный метод расчета интегралов перекрытия	202

§ 6. Метод парциального анализа вибронного перехода	204
§ 7. Геометрическая конфигурация возбужденного состояния	208
§ 8. Запрещенные электронные переходы	209
§ 9. Вибронный переход в трехатомной молекуле вида XY_2	214
§ 10. Правила сумм для вибронных переходов	221
§ 11. Вырожденные вибронные переходы	226
§ 12. Электронный переход, вызывающий нарушение симметрии молекулы	234
Глава VIII. Симметрии релятивистских волновых уравнений и уравнений с внутренними переменными	238
§ 1. Динамическая симметрия релятивистского волчка	238
§ 2. Релятивистские осцилляторные модели	243
§ 3. Уравнение Майорана	250
§ 4. Симметрия уравнений движения свободной релятивистской частицы	255
§ 5. Динамическая симметрия релятивистской частицы в магнитном поле	257
Глава IX. Когерентные состояния и функции Грина релятивистских квадратичных систем	261
§ 1. Движение релятивистской заряженной частицы в однородном стационарном электромагнитном поле	261
§ 2. Движение релятивистской заряженной частицы в суперпозиции поля плоской волны и стационарного внешнего поля	269
Глава X Матричные элементы представлений групп динамической симметрии	279
§ 1. Матричные элементы преобразования Боголюбова и переходы между уровнями Ландау в нестационарном магнитном поле	279
§ 2. Когерентные состояния симметричного волчка	281
§ 3. Квазиклассическая асимптотика d -функций — матричных элементов группы вращений $O(3)$	287
Приложение	296
I. Алгебры Ли	296
II. Линейные группы Ли	301
III. Алгебры Ли линейных групп Ли	305
Литература	309

Предлагаемая читателю монография посвящена проблемам квантовой физики. В последнее десятилетие выявился новый круг задач и развился новый подход к описанию квантовых систем и их связи с соответствующими классическими системами. Центральным пунктом этого подхода является использование полного набора интегралов движения квантовых систем, который применяется для построения, с одной стороны, когерентных состояний квантовой системы, являющихся такими волновыми пакетами, которые максимально адекватны классической картине движения системы, и, с другой стороны, позволяет построить некоторую алгебраическую конструкцию — динамическую группу квантовой системы.

Динамическая группа симметрии квантовой системы позволяет единым образом рассматривать полный набор состояний системы, энергетический спектр (если система стационарна), функцию Грина системы в разных представлениях, матричные элементы и вероятности переходов, например радиационных, причем знание динамической группы симметрии квантовой системы эквивалентно знанию уравнения, описывающего систему, и решений этого уравнения (уравнение Шредингера, Дирака и др.). Поэтому при некоторых предположениях можно сформулировать поведение физической системы только в терминах теории представлений соответствующей группы, даже не используя уравнение. Эта важная концепция особенно ярко проявляется в теории элементарных частиц, где нет общепринятого уравнения, описывающего свойства элементарных частиц, и их классификация проводится на основе теории представлений таких полупростых групп Ли, как группы $SU(2)$, $SU(3)$, $SU(6)$. Некоторые аспекты динамики частиц описываются другими группами, например конформной группой.

Слова «квантовая система» понимаются достаточно широко, чтобы включить в рассмотрение не только задачи, связанные с поведением таких физических квантовых систем, как молекула или элементарная частица (в рамках релятивистских уравнений с внутренними степенями свободы), но использовать концепции инвариантов и когерентных состояний в других физических и математических задачах, для описания которых используется формальный аппарат, близкий уравнению Шредингера. Существенно, чтобы в рассматриваемых задачах имелся аналог оператора эволюции (функции Грина) квантовой системы.

Большое внимание в монографии уделяется нестационарным квантовым системам, которые изучены существенно менее стационарных систем, в частности периодическим во времени квантовым системам и их спектрам квазиэнергий. Мы покажем на примерах, важных в приложениях, в частности квадратичных квантовых систем, эффективность развиваемых методов, приведя решения тех задач, которые были получены с помощью этих методов лишь в последнее время. К таким задачам относится построение динамических групп симметрии простейших квантовых систем, например конформной группы $O(4, 2)$ для атома водорода, нахождение инвариантов, построение временной функции Грина и когерентных состояний для систем, описываемых произвольным, нестационарным, квадратичным по операторам рождения и уничтожения гамильтонианом, нахождение матрицы плотности и энергетической функции Грина квадратичных систем, построение спектра квазиэнергий произвольных квадратичных систем и описание его с помощью динамической группы симметрии. Как приложения развитых методов в монографии подробно рассмотрено движение заряженных нерелятивистских и релятивистских частиц в постоянных и переменных электромагнитных полях, в частности в полях волноводов, рассчитаны точно интенсивности в вибронном спектре многоатомной молекулы, приведены новые формулы, относящиеся к свойствам матричных элементов неприводимых представлений симплектической группы и связанных с ними многомерных полиномов Эрмита и их аналогов.

На включение в монографию тех или иных вопросов наложили отпечаток научные интересы авторов, часть материала связана с тематикой лекций, читавшихся авторами на протяжении ряда лет в Московском физико-техническом институте. Материал глав

I—IV и VIII подготовлен к печати В. И. Манько, а глав V—VII, IX, X и приложения — И. А. Малкиным.

Авторы считают своим приятным долгом поблагодарить академиков В. Л. Гинзбурга и М. А. Маркова за многолетнюю помощь и многочисленные обсуждения результатов, затрагиваемых в настоящей монографии. Авторы благодарят В. В. Додонова, Е. В. Докторову, Е. В. Иванову, Е. В. Курмышеву, Д. А. Трифонову, А. П. Шустову за плодотворное сотрудничество в получении результатов, нашедших отражение в предлагаемой читателю монографии.

Авторы

§ 1. Введение

Алгебраический подход к описанию квантовых систем состоит в изучении соотношений и представлений различных операторов, физических величин, относящихся к этим системам. Преимущество подобного подхода состоит в том, что с его помощью можно сразу получить такие физические величины, как энергетические уровни, вырождение их, амплитуды переходов (без предварительного нахождения волновых функций). Волновые функции также можно определить с помощью явных представлений имеющихся алгебраических соотношений, но это отдельный вопрос. Предметом настоящей главы служит алгебраический подход в квантовой теории, известный сейчас как теория динамических симметрий.

Из многих операторов, относящихся к изучаемой физической системе, можно построить различные алгебраические структуры. Например, алгебра Ли операторов симметрии гамильтониана давно и широко использовалась, кроме всего прочего, для понимания вырождения уровней энергии до решения уравнения Шредингера. В последнее время для расчета величин, которые зависят в большей степени от динамики системы, чем от свойств симметрии энергетического уровня рассматриваемой системы, применялись другие алгебры Ли, которые обычно включают в себя гамильтониан, операторы симметрии и некоторые другие операторы, не коммутирующие с гамильтонианом. Эти дополнительные операторы или, по крайней мере, подходящие линейные комбинации часто в результате явного вида их матричных элементов между состояниями с разными энергиями можно интерпретировать как операторы переходов, вызываемых некоторым взаимодействием, или просто как повышающие и понижающие операторы. Действительно, независимые собственные функции гамильтониана служат в качестве базиса представления, часто неприводимого, алгебры Ли, содержащей повышающие и понижающие операторы. Любую такую алгебру можно назвать динамической алгеброй, поскольку в процессе нахождения ее представления определяются также матричные элементы таких динамических величин, как гамильтониан и операторы переходов.

Следуя [16], под динамической группой системы будем понимать конечномерную группу Ли, неприводимое представление которой действует в гильбертовом пространстве состояний системы.

При этом подразумевается, что операторы симметрии, гамильтониан и все операторы переходов соответствуют элементам или группы, или алгебры Ли, или ее обертывающей алгебры. Это последнее условие необходимо для того, чтобы динамическая алгебра отличалась от так называемой генирирующей спектр алгебры, из которой можно найти спектр энергий, но не всю информацию о динамике переходов.

Остановимся на истории вопроса. Исследования динамических групп стимулировались желанием понять природу классификации элементарных частиц по мультиплетам унитарной $SU(3)$ -группы [1, 2]. Это вновь вызвало интерес к подходу, развитому Фоком [3], по объяснению классификации уровней атома водорода по мультиплетам $O(4)$ -группы (см. также [4]). Параллельно с исследованиями возможности перехода от унитарных мультиплетов $SU(3)$ -группы ко все более широким семействам типа мультиплетов $SU(6)$ -группы [5 — 7] проводились исследования квантовой теории, которая связана с рассмотрением физических состояний квантовых систем как членов мультиплетов, описываемых неприводимыми представлениями тех или иных групп.

Почти одновременно появились работы Барута [8], Дотана, Гелл-Манна и Несмана [9], а также Мукунды, О'Рэферти и Сударшана [10], в которых были введены близкие понятия такой группы (или алгебры Ли), позволяющие объединить все уровни энергии стационарной квантовой системы в один мультиплет некомпактной группы (или алгебры). В работе [8] эта группа (или алгебра) названа динамической, в работе [9] — алгеброй, генерирующей спектр, а в работе [10] — группой инвариантности. Эти понятия очень близки, хотя разные авторы до сих пор вкладывают несколько разный смысл в слова «динамическая группа» или «группа инвариантности». Мы будем рассматривать подобные понятия как тождественные, хотя отдадим предпочтение понятию «динамическая группа» или «динамическая симметрия» квантовой системы.

Здесь следует отметить, что понятие динамической симметрии, данное в работах [8 — 10], является частным случаем введенного в работе [11] определения понятия симметрии любого уравнения, описывающего физическую систему, например, квантовую систему. В работе [11] проводился также анализ динамической симметрии атома водорода и было показано, что все уровни его дискретного спектра образуют мультиплет конформной $O(4, 2)$ -группы. Этот результат для атома водорода затем был получен Несманом [12], Намбу [13], Фронсдалом [14], Барутом и Клейнертом [15] и Тодоровым [16]. Интерес к этой системе был вызван тем, что она реальна и уравнение Шредингера для нее можно решить точно, а следовательно, до конца проанализировать связь состоя-

ний как с решениями уравнения, так и с неприводимым представлением $O(4, 2)$ -группы, которое в принципе можно ввести и не прибегая к помощи уравнения Шредингера.

Вслед за этими работами стали появляться работы по исследованию динамических симметрий других точно решаемых моделей квантовых систем. Так, квантовая система n -мерный осциллятор рассматривалась с точки зрения динамической группы Хва и Нутсом [17], а также Мошинским и Квезне [18]. Здесь следует отметить, что первая работа, по существу описывающая осциллятор (одномерный) на языке динамической $O(2, 1)$ -группы, была сделана Гошеном и Липкиным [19] еще в 1959 г. и затем их результат был несколько раз повторен. Исследование динамических групп простых квантовых систем привело к использованию этих групп для объяснения спектров масс элементарных частиц, различных форм-факторов и ширины распадов, а также к новому подходу к бесконечнокомпонентным уравнениям типа Майорана [13, 20, 21]. Кроме конформной $O(4, 2)$ -группы, в некоторых работах в качестве динамической группы атома водорода рассматривалась также $O(4, 1)$ -группа де Ситтера [22—28]. Динамическая группа еще одной простой квантовой системы — ротатора рассматривалась в работах [29 — 31].

Подход, основанный на динамических симметриях, тесно связан с изучением групп инвариантности [10] или симметрии квантовых систем, т. е. групп, генераторы которых коммутируют с гамильтонианом стационарной системы. Кроме работы Фока [4], объяснившего «случайное» вырождение уровней атома водорода существованием $O(4)$ -группы инвариантности у этой системы, были проведены исследования групп инвариантности других простых квантовых систем и их связи с вырождением уровней. Так, в работах Яуха [32] и Яуха и Хилла [33] впервые было объяснено вырождение уровней энергии изотропного осциллятора существованием у этой системы группы инвариантности $U(3)$ (и $U(n)$ в n -мерном случае). Этот результат был далее развит в работах [34, 35]. Неизотропный осциллятор рассматривался с точки зрения группы инвариантности в работах [36 — 41]. Сформулируем здесь основное отличие группы инвариантности и динамической группы. Если известна вся информация об одном состоянии системы, относящемся к фиксированному уровню энергии, то с помощью преобразований из группы инвариантности (или группы симметрии) можно получить все остальные состояния с той же энергией, т. е. небольшое число состояний в случае конечного вырождения. Преобразования же динамической группы из одного состояния генерируют все другие состояния квантовой системы. Здесь мы расширим обычное понимание динамической группы, подразумевая под словом «состояние» не только состояние с заданной энергией, как это делается обычно, а включая и случай произвольных нестационарных квантовых систем [42 — 44].

Развитие теории динамических симметрий привело также

к значительному продвижению в чисто математическом плане. Так, при вычислении матричных элементов различных операторов между состояниями с заданными энергией и полным моментом оказалось удобным использовать динамическую группу радиального уравнения Шредингера, в частности $O(2, 1)$ -группу [45 — 47]. Вычисление радиальных матричных элементов операторов физических величин этим методом состоит в изучении их трансформационных свойств под действием операций из динамической группы. Затем применяется переход к удобному базису с помощью оператора «буста». В частности, с помощью рассуждений, аналогичных следствиям теоремы Вигнера — Эккерта (для некомпактной динамической группы), легко получить правила отбора для вычисляемых радиальных матричных элементов в полной аналогии с обычным компактным случаем.

Таким образом, динамические группы или алгебры позволяют не только продвинуться в понимании природы спектра состояний, но полезны и в прикладном плане. Разумеется, в тех случаях, когда имеются точно решаемые уравнения, описывающие систему, можно полностью обойтись без знания свойств симметрии, в частности динамической, для вычисления физических величин. Однако в случаях, когда уравнения не найдены, например для элементарных частиц, подход с динамическими симметриями дает самостоятельную альтернативу для описания всей динамики. В этой связи необходимо научиться формулировать всю динамику системы на языке динамической группы в случаях, когда можно проверить все выводы с помощью точно решаемых уравнений, т. е. для простейших систем.

Существование динамической алгебры Ли для квантовой системы, содержащей повышающие и понижающие операторы, не удивительно. Интересным является тот факт, что эта алгебра — часто конечномерная алгебра Ли. Рассмотрим, например, одномерную задачу о частице массы m , движущейся под действием потенциала $V(x)$ (эта функция считается бесконечно дифференцируемой). Предположим, что наша алгебра содержит, наряду с гамильтонианом \mathcal{H} , оператор x , пропорциональный оператору дипольного момента (понятное предположение, если мы считаем, что эта алгебра должна содержать операторы, отвечающие за переходы в системе).

Тогда алгебра содержит коммутатор $[\mathcal{H}, x] = [p^2/2m, x] = -i\hbar p/m$, где p — оператор импульса, а также коммутаторы $[\mathcal{H}, p] = [V(x), p] = i\hbar dV/dx$; $[dV/dx, p] = i\hbar d^2V/dx^2$.

Ясно, что за исключением лишь некоторых потенциалов специального вида, в результате получаем бесконечномерную алгебру. В этих моделях, чтобы построить конечномерную алгебру, необходимо иногда рассматривать оператор дипольного перехода как лежащий не в алгебре Ли, а в ее обертывающей алгебре. Проблема существования динамических групп физических систем

в настоящее время полностью не решена в теории динамических симметрий. Если такая группа найдена, она может быть не единственной. До какой степени динамические группы определяются единственным образом — еще один не ясный до конца вопрос. К настоящему моменту наиболее интенсивная деятельность в теории динамических симметрий была направлена на выяснение их роли в конкретных моделях, хотя имеется ряд попыток исследовать природу динамических групп в общем плане.

В первой и последующих главах сначала будут приведены главные результаты, которые получены для различных моделей, исследовавшихся с точки зрения динамических групп; будут разобраны более общие аспекты теории; подробно рассмотрены некоторые перерелятивистские квантовые системы, в частности простейшая из них — квантовый гармонический осциллятор, для того чтобы можно было увидеть, как теория динамических симметрий «работает» для простой модели. Затем будут рассмотрены динамические симметрии релятивистских квантовых систем, описана общая связь интегралов движения с динамическими группами, разобраны результаты работ, в которых были развиты методы нахождения инвариантов, причем будут рассмотрены некоторые примеры нестационарных систем. Далее мы коснемся также проблем динамических симметрий в классической механике. В заключение, наряду с общим обсуждением, дадим краткий обзор приложения метода динамических симметрий к конкретным задачам.

§ 2. Динамические системы, функция Грина и матрица плотности

Мы будем в дальнейшем исследовать главным образом конечномерные квантовые системы, описываемые волновой функцией $\Psi(x_1, \dots, x_n, t)$, зависящей от n координат и времени. Волновая функция Ψ удовлетворяет уравнению Шредингера (мы также будем рассматривать и релятивистские системы)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} \Psi, \quad (2.1)$$

где гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}$ является эрмитовым оператором (иногда мы будем рассматривать и неэрмитовы гамильтонианы), \hbar — постоянная Планка. Гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}$ может явно зависеть от времени. Очень важную роль в дальнейшем играет функция Грина квантовой системы, являющаяся ядром оператора эволюции этой системы и содержащая всю информацию о системе.

Пусть волновая функция n -мерной квантовой системы $\Psi(x, t)$, $x = (x_1, \dots, x_n)$, выражена через волновую функцию $\Psi(x, t_0)$ квантовой системы в предшествующий момент времени $t_0 < t$ с помощью некоторого оператора эволюции \hat{U} :

$$\Psi(x, t) = \hat{U}(t, t_0) \Psi(x, t_0). \quad (2.2)$$

Тогда можно записать это равенство в «матричном» виде:

$$\Psi(x, t) = \int G(x, x', t, t_0) \Psi(x', t_0) dx'. \quad (2.3)$$

Интегрирование происходит по всем допустимым переменным — координатам системы x' . Если подставить соотношения (2.2) или (2.3) в уравнение Шредингера (2.1), мы получим уравнение для оператора эволюции \hat{U} и его ядра, а именно, оператор эволюции удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} \hat{U}, \quad (2.4)$$

а его ядро — функция Грина G — удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial G}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}(x) G; \quad t > t_0. \quad (2.5)$$

В соотношении (2.5), являющемся матричной формой операторного соотношения (2.4), оператор $\hat{\mathcal{H}}(x)$ действует только на переменные x в функции Грина G . Соотношения (2.4) и (2.5) следует дополнить начальными условиями, которые очевидны. Так как при совпадающих временах волновые функции $\Psi(t)$ и $\Psi(t_0)$ также должны совпадать, то оператор эволюции должен превращаться в единичный оператор, т. е.

$$\hat{U}(t_0, t_0) = I. \quad (2.6)$$

Ядром единичного оператора в координатном представлении является δ -функция Дирака, поэтому функция Грина должна удовлетворять условию

$$G(x, x', t_0, t_0) = \delta(x - x'). \quad (2.7)$$

Уравнение для функции Грина (2.6) можно уточнить, введя в рассмотрение времена $t < t_0$. В уравнении Шредингера обычно полагают функцию Грина при $t < t_0$ равной нулю. Отсюда сразу вытекает, что так определенная функция Грина G удовлетворяет уравнению с δ -образной правой частью

$$i\hbar \frac{\partial G}{\partial t} - \hat{\mathcal{H}}G = i\hbar \delta(t - t_0) \delta(x - x'). \quad (2.8)$$

Правая часть возникает из-за дифференцирования скачкообразного изменения функции Грина во времени.

Другим важным уравнением, которое мы будем рассматривать, является уравнение Блоха для матрицы плотности квантовой системы. Матрица плотности квантовой системы $\rho(x, x', \beta)$, являющаяся ядром оператора $\hat{\rho} = \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}})$, где β — параметр, удовлетворяет уравнению Блоха, аналогичному уравнению (2.8), с очевидной подстановкой $t_0 = 0$, $it/\hbar = \beta$:

$$\left[\frac{\partial}{\partial \beta} + \hat{\mathcal{H}}(x) \right] \rho(x, x', \beta) = \delta(\beta) \delta(x - x'). \quad (2.9)$$

Отметим, что уравнение Шредингера для функции Грина (2.8) и уравнение Блоха для матрицы плотности являются уравнениями типа

$$\partial S(x, x', \tau) / \partial \tau = \hat{A}(x) S(x, x', \tau); \quad \tau > 0; \quad S(0) = \delta(x - x'). \quad (2.10)$$

Здесь τ — параметр, оператор $\hat{A}(x)$ действует на переменные x функции S . Функция S является либо функцией Грина G уравнения Шредингера, если $\hat{A}(x) = \hat{\mathcal{H}}(x)$ и $\tau = it/\hbar$, либо матрицей плотности, если оператор $\hat{A} = -\hat{H}$ и $\tau = \beta$.

Многие результаты, обсуждаемые в дальнейшем для функций Грина или для матриц плотности, остаются справедливыми для любых задач, описываемых уравнением типа уравнения (2.10). Функция Грина описывает поведение динамической системы. Но мы под словами «динамическая система» будем подразумевать все случаи физических или математических задач, которые описываются уравнением типа уравнения (2.10). Запишем также важные ограничения, вытекающие из эрмитовости гамильтониана системы $\hat{\mathcal{H}}$, как стационарного, так и нестационарного.

Для всех эрмитовых гамильтонианов оператор эволюции \hat{U} унитарен (сохраняет скалярное произведение $(\hat{U}\varphi, \hat{U}\Psi) = (\varphi, \Psi)$):

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = I. \quad (2.11)$$

Это соотношение приводит к условиям для матричных элементов оператора \hat{U} (функция Грина) в любом базисе. Так, в координатном представлении имеем соотношение

$$\int G(x, y, t) G^*(x', y, t) dy = \delta(x - x'). \quad (2.12)$$

В любом дискретном базисе выполняется соотношение для матричных элементов $U_{nm}(t)$ (функции Грина) вида

$$\sum_m U_{nm}(t) U_{sm}^*(t) = \delta_{ns}. \quad (2.13)$$

Если функция Грина $U_{nm}(t)$ выражена через какие-то специальные функции, то (2.13) означает наличие определенных правил сумм для этих специальных функций. Соотношение (2.13) означает также наличие ряда неравенств. Так, из того, что при $n = s$ (2.13) переходит в соотношение

$$\sum_m |U_{nm}|^2 = 1, \quad (2.13a)$$

вытекает неравенство

$$|U_{nm}(t)| \leq 1. \quad (2.14)$$

Функция $W_{nm}(t) = |U_{nm}(t)|^2$ есть (при фиксированном n) распределение вероятностей по состояниям, задаваемым дискретным индексом (набором индексов) m . Соотношение (2.13) есть нормировка этого распределения. Аналогичная интерпретация имеется

и в недискретных базисах (см. (2.12)). В других представлениях условие унитарности (2.11) дает определенные связи, причем по части индексов (квантовых чисел) может вестись суммирование, а по части — интегрирование. Из физических условий (причинности развития динамической системы во времени) вытекает также очевидное нелинейное соотношение, справедливое как для эрмитовых, так и неэрмитовых гамильтонианов:

$$\hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0) = \hat{U}(t_2, t_0) \quad (t_2 > t_1 > t_0). \quad (2.15)$$

Это нелинейное соотношение определяет, в частности, нормировочную константу функции Грина. Хотя многие результаты, обсуждаемые в последующих главах, легко переносятся на бесконечномерные квантовые системы, описываемые уравнениями квантовой теории поля, мы для определенности будем считать заданную систему обладающей конечным числом степеней свободы. Заметим также, что в обозначениях Дирака функция Грина $G(x, x', t)$ ($t_0 = 0$) совпадает с матричным элементом оператора эволюции системы $\hat{U}(t)$, взятым между состояниями с заданными координатами x и x' , а именно:

$$G(x, x', t) = \langle x | \hat{U}(t) | x' \rangle. \quad (2.16)$$

Ясно, что можно строить матричные элементы оператора эволюции, используя и другие базисы. В частности, волновая функция квантовой системы $\Psi(x, t)$ есть матричный элемент оператора эволюции $\hat{U}(t)$ между состояниями $|\Psi\rangle$ и $|x\rangle$, т. е.

$$\Psi(x, t) = \langle x | \hat{U}(t) | \Psi \rangle.$$

Таким образом, знание полного набора решений уравнения Шредингера эквивалентно знанию функции Грина в координатном представлении, и наоборот. Волновая функция есть функция Грина в «косом» базисе. Можно строить функцию Грина и в дискретных представлениях. Это построение сводится к нахождению матричного элемента оператора эволюции между состояниями системы, характеризуемыми набором дискретных параметров. Все обсуждаемые функции Грина эквивалентны, и выбор представления, в котором берется функция Грина, определяется лишь удобством рассмотрения. То, что говорилось выше о квантовой системе, описываемой скалярной волновой функцией, остается справедливым, с очевидными изменениями, для волновых функций, имеющих несколько компонент. При этом функция Грина системы в любом представлении приобретает еще дополнительные дискретные матричные индексы.

Важную информацию о динамических системах дает изучение свойств симметрии этих систем. Чтобы четко понимать, что подразумевается под словами «симметрия динамической системы» или «симметрия квантовой системы», мы сейчас обсудим более широкий вопрос о симметрии уравнений вообще, поскольку именно изуче-

ние свойств симметрии уравнений для волновой функции (2.1) или функции Грина (2.8) позволяет сделать заключение о симметрии физической системы, описываемой этими уравнениями.

§ 3. Симметрия уравнений

Обсудим здесь вопрос, что будем понимать под симметрией уравнения [11].

Пусть имеется функция $\varphi(x_1, \dots, x_n)$. Эта функция может быть конечно- или бесконечномерным столбцом. Рассмотрим соотношение

$$\hat{A}\varphi = 0, \quad (3.1)$$

где \hat{A} для простоты будем считать линейным дифференциальным оператором, хотя для дальнейших рассуждений это несущественно (он может быть любым: интегральным, интегродифференциальным, нелинейным и т. д.). Обычно под симметрией соотношения (3.1) понимают совокупность таких преобразований координат и функций, которые образуют группу и не меняют его вид. (Однако такая симметрия не объясняет вырождения уровней трехмерного осциллятора, волновые функции которого, как показали Яух и Хилл [33], реализуют представления $U(3)$ -группы.) В этом случае под симметрией понимают совокупность операторов \hat{B}_α , образующих алгебру Ли и удовлетворяющих соотношению

$$[\hat{A}, \hat{B}_\alpha] = 0. \quad (3.2)$$

(Индекс α принимает конечное или бесконечное число значений.) Это понятие о симметрии является более широким, так как оно включает в себя предыдущее, потому что если имеются конечные преобразования координат и функции, сохраняющие вид уравнения, то всегда, переходя к бесконечно малым преобразованиям, найдем алгебру Ли операторов, удовлетворяющих (3.2). Будем понимать симметрию в еще более широком смысле, исходя из следующего соображения. Всегда, когда говорят о симметрии уравнения (3.1), имеют в виду, что если найдено какое-то решение, то с помощью преобразований симметрии можно получить и другие решения; иными словами, пространство решений является базисом представлений той группы или алгебры Ли, которую считают симметрией задачи. Эту симметрию можно найти, если определить операторы \hat{B}_α (дифференциальные, интегральные, нелинейные и т. д.), образующие алгебру Ли (конечномерную или бесконечномерную) и удовлетворяющие соотношению

$$[\hat{A}, \hat{B}_\alpha]\varphi = 0, \quad (3.3)$$

т. е. коммутирующие с оператором \hat{A} не тождественно, а на множестве решений уравнения (3.1). Очевидно, что операторы \hat{B}_α переводят одно решение в другое. Подобное определение охватывает

предыдущие, так как операторы, удовлетворяющие соотношению (3.2), образуют подалгебру алгебры операторов, удовлетворяющих (3.3). Удобнее говорить не о группе, а об алгебре Ли, так как с группы всегда можно перейти к алгебре Ли, а классификация решений с помощью квантовых чисел — это классификация с помощью представлений алгебры Ли. Интересным является такой вопрос: какие неприводимые представления группы симметрии уравнения (3.1) реализуются в качестве решений? Из примеров ясно, что не все представления, которые есть у группы, реализуются на решениях. Так, решения трехмерного осциллятора реализуют лишь $(n, 0, 0)$ -представления $U(3)$ -группы. Более того, может случиться, что реализуется лишь одно представление группы (часто это и есть динамическая группа системы). Такое определение симметрии уравнений дано в работах [44, 31], подобное же определение дано и Андерсоном, Кумесом и Вульфманом [48]. Заметим, что оператор \hat{A} может быть любым оператором, описывающим физическую проблему, в частности:

а) $\hat{A} = \frac{i\hbar\partial}{\partial t} - \hat{\mathcal{H}}$ — уравнение Шредингера;

б) $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathcal{H}_{cl}(q, p)$ — уравнение Гамильтона — Якоби;

в) $\hat{A} = \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial q}$ — уравнение Эйлера — Лагранжа;

г) $\hat{A} = \Gamma_{\mu} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} + \Gamma_0$ — конечно- и бесконечнокомпонентные уравнения теории поля.

Покажем, что в классической механике приводимое и в дальнейшем широко используемое для изучения квантовых систем определение симметрии (3.1), (3.3) позволяет провести анализ преобразований, которые допускает система, описываемая системой обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка.

Рассмотрим, следуя Картану ([401], стр. 108), механическую систему, траектории которой удовлетворяют системе обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$\frac{dx_1}{X_1} = \frac{dx_2}{X_2} = \dots = \frac{dx_n}{X_n}. \quad (3.4)$$

Легко проверить, что первый интеграл $\varphi(x_i, t)$ этой системы удовлетворяет уравнению вида $\hat{A}\varphi = 0$, где оператор $\hat{A} = \sum_i X_i \partial/\partial x_i$.

В книге Картана [401] исследуется вопрос: когда приведенная система уравнений допускает инфинитезимальное преобразование, задаваемое оператором вида $\hat{B} = \sum_i \xi_i(x) \partial/\partial x_i$? Это означает, что если φ — первый интеграл, то и $\hat{B}\varphi$ — первый ин-

теграл системы, т. е. $\hat{A}(\hat{B}\varphi) = 0$. Таким образом, $\hat{A}(\hat{B}\varphi) - \hat{B}(\hat{A}\varphi) = 0$. В [4] показано, что $[\hat{A}\hat{B}]\varphi = \rho\hat{B}\varphi$, где ρ — некоторый коэффициент. Таким образом, мы видим, что для классической механической системы инфинитезимальное преобразование $\hat{B} = \sum_i \xi_i(x) \partial/\partial x_i$ является преобразованием симметрии системы обыкновенных дифференциальных уравнений в определенном формулами (3.1), (3.3) смысле.

Если пайдена динамическая группа уравнения столь широкая, что все решения рассматриваемого уравнения связываются операторами преобразований из этой группы, то в определенном смысле динамическая группа и ее представление, реализуемое на пространстве решений, заменяют само уравнение. Это позволяет сформулировать физические проблемы не на языке уравнений, а на языке групп. Разумеется, верно и обратное. Чисто алгебраический подход к задаче можно эквивалентным образом заменить подходом, основанным на рассмотрении уравнений. Однако в силу простоты и развитости групповых методов проще и удобнее работать в рамках чисто группового подхода. Цель этого подхода — сформулировать все физические величины, относящиеся к рассматриваемой системе (такие, как спектр энергий, масс, квантовые числа, функция Грина или оператор эволюции, амплитуда рассеяния, амплитуда переходов), на языке теории представлений групп (Ли или других групп).

§ 4. Динамическая симметрия квантового осциллятора

Впервые некомпактная $U(1, 1)$ -группа была использована при рассмотрении задачи о квантовом осцилляторе Гошеном и Липкиным [19]. Связь осциллятора с этой некомпактной динамической группой более детально изучена Барутом [49]. Следуя этим статьям и используя принятые в них обозначения, проведем рассмотрение динамической симметрии данной системы. Алгебра Ли $U(1, 1)$ -группы изоморфна алгебре Ли $O(2, 1)$ -группы Лоренца. Три генератора этой группы, L_{12} , L_{13} и L_{23} , обладают коммутационными соотношениями

$$[L_{\mu\nu}, L_{\rho\lambda}] = -ig_{\mu\rho}L_{\nu\lambda}; \quad g_{11} = g_{22} = 1; \quad g_{33} = -1. \quad (4.1)$$

Эта группа обладает унитарным представлением, задаваемым числом s , связанным с собственным значением оператора*) Казимира C :

$$C = L_{12}(L_{12} + 1) + 2M_-M_+; \quad M_{\pm} = (iL_{13} \pm L_{23})/\sqrt{2}. \quad (4.2)$$

Собственные значения оператора Казимира C выражаются числом s обычным образом: $s(s + 1) = C$; $D^{\dagger}(s)$ -представление ха-

*) Всюду далее значок \wedge над оператором опускаем.

рактерно тем, что собственное значение m оператора L_{12} ограничено снизу, причем для случая $C = -1/4$ или $s = -1/2$ это число равно $m = 1/2$. Операторы $O(2, 1)$ -группы действуют в пространстве, базисом в котором являются функции

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle, \quad (4.3)$$

построенные с помощью операторов рождения $a^\dagger = (x - \partial/\partial x)/\sqrt{2}$ из основного состояния $|0\rangle = \pi^{-1/4} \exp(-x^2/2)$. Операторы M_\pm связаны с операторами рождения и уничтожения a , a^\dagger следующим образом:

$$M_+ = -(a^\dagger/\sqrt{2})(L_{12} + 1/2)^{1/2}; \quad M_- = (a/\sqrt{2})(L_{12} - 1/2)^{1/2}. \quad (4.4)$$

Коммутационные соотношения операторов a , a^\dagger и L_{12} имеют вид

$$[L_{12}, a] = -a; \quad [L_{12}, a^\dagger] = a^\dagger. \quad (4.5)$$

Гамильтониан осциллятора выражается через оператор — генератор некомпактной $O(2, 1)$ -группы:

$$\mathcal{H} = \hbar\omega L_{12}. \quad (4.6)$$

Оператор Казимира $C = L_{12}^2 - L_{13}^2 - L_{23}^2$ при выборе представления в виде (4.4) тождественно равен числу, а именно $C = -1/4$. Матричные элементы операторов M_\pm , L_{12} в базисе $|n\rangle$ имеют вид

$$\langle m | M_+ | n \rangle = -2^{-1/2} (n+1) \delta_{m, n+1}; \quad (4.7)$$

$$\langle m | M_- | n \rangle = 2^{-1/2} n \delta_{m, n-1}; \quad \langle m | L_{12} | n \rangle = (n + 1/2) \delta_{m, n}.$$

Можно построить также представление алгебры Ли $O(2, 1)$ -группы с оператором Казимира $C = -1/4$, воспользовавшись следующей реализацией генераторов:

$$M_+ = \sqrt{a^\dagger a} a^\dagger; \quad M_- = a \sqrt{a^\dagger a}; \quad L_{12} = a^\dagger a + 1/2. \quad (4.8)$$

Таким образом, существует динамическая группа (набор генераторов, не коммутирующих с гамильтонианом), связывающая все уровни гармонического осциллятора в одно неприводимое представление.

§ 5. Динамическая симметрия ротатора

В качестве примера рассмотрим в этом параграфе динамическую симметрию другой простейшей квантовой системы — волчка. Эта система рассматривалась в работе Мукунды, О'Рэферти, Сударшана [10] и в работе Дотана, Гелл-Манна и Неемана [9] (см.

также подробную работу Боба [29]). Система представляет собой точку с закрепленным расстоянием от начала координат. Ее положение задается угловыми координатами точки на сфере. Гамильтониан системы в случае движения по сфере задается формулой

$$\mathcal{H} = L^2/2J, \quad (5.1)$$

где L — оператор момента количества движения, J — момент инерции. Поскольку спектр оператора квадрата момента количества движения хорошо известен, спектр энергий системы имеет вид $E_l = l(l+1)\hbar^2/2J$, причем состояние с заданной энергией E_l вырождено по проекции момента L_z на ось z . Кратность вырождения уровней энергии ротатора $2l+1$ обусловлена симметрией гамильтониана (5.1) относительно группы трехмерных вращений. В рамках подхода, основанного на динамических симметриях, можно, как и в случае осциллятора, объединить все уровни энергии в бесконечный мультиплет более широкой, некомпактной, группы. Это можно сделать, построив дополнительный генератор F , причем этот дополнительный генератор является вектором по отношению к группе вращений:

$$[L_i, F_k] = i\epsilon_{ikl}F_l. \quad (5.2)$$

Вектор F обладает дополнительным свойством, что при коммутации его компонент друг с другом получаем вектор углового момента L . Базис в пространстве состояний ротатора задается сферическими функциями $Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \Psi_{l,m}^l$. Здесь m — проекция углового момента. Действие оператора на этом базисе можно задать с помощью формул [50]

$$L_{\pm} = L_1 \pm iL_2; \quad F_{\pm} = F_1 \pm iF_2;$$

$$L_+ \Psi_m^l = \sqrt{(l-m+1)(l+m)} \Psi_{m+1}^l; \quad L_3 \Psi_m^l = m \Psi_m^l;$$

$$F_+ \Psi_m^l = \sqrt{(l-m)(l-m-1)} C_l \Psi_{m+1}^{l-1} - \\ - \sqrt{(l-m)(l+m+1)} A_l \Psi_{m+1}^l + \\ + \sqrt{(l+m+1)(l+m+2)} C_{l+1} \Psi_{m+1}^{l+1};$$

$$F_3 \Psi_m^l = \sqrt{(l-m)(l+m)} C_l \Psi_m^{l-1} - mA_l \Psi_m^l - \\ - \sqrt{(l+m+1)(l-m+1)} C_{l+1} \Psi_m^{l+1}; \quad (5.3)$$

$$F_- \Psi_m^l = -\sqrt{(l+m)(l+m-1)} C_l \Psi_{m-1}^{l-1} - \\ - \sqrt{(l+m)(l-m+1)} A_l \Psi_{m-1}^l - \sqrt{(l-m+1)(l-m+2)} \times \\ \times C_{l+1} \Psi_{m-1}^{l+1}.$$

Оператор F задается, таким образом, своими матричными элементами. Числа A_l и C_l задаются формулами

$$A_l = \frac{ik_0c}{l(l+1)}; \quad C_l = \frac{i\sqrt{(l^2-k_0^2)(l^2-c^2)}}{l(4l^2-1)}. \quad (5.4)$$

Вместо чисел k_0 и c можно выбрать другую пару констант m и ρ , связанных с k_0 и c формулами

$$k_0 = |m/2|; \quad c = -i(\text{sign } m)\rho/2. \quad (5.5)$$

Величины m и ρ задают неприводимое представление $SL(2, C)$ -группы Лоренца. Таким образом, видим, что уровни энергии ротатора можно объединить в одно неприводимое представление группы Лоренца. Причем можно реализовать различные возможности. Так, можно подсовокупности уровней E_l с $l \leq l_0$ рассматривать как одно неприводимое представление компактной $O(4)$ -группы [10], а остальную часть спектра рассматривать как представление группы Лоренца. Можно также связать с различными подсовокупностями уровней ротатора представление $SU(3)$ -группы. Объединение конечного числа уровней с разными энергиями в один мультиплет компактной группы полностью аналогично объединению уровней многомерного осциллятора с разными частотами в мультиплет $SU(n)$ -группы [51]. Объединение уровней ротатора с $l \leq l_0$ в мультиплет $O(4)$ -группы легко выполняется с помощью переноса соответствующих формул (см. ниже), справедливых для атома водорода, где состояния с заданной энергией вырождены по моменту и момент пробегает ряд значений от нуля до $n - 1$ (здесь n — главное квантовое число). Выбором параметра ρ в (5.5) можно менять представление группы Лоренца, описывающее весь спектр энергий ротатора.

§ 6. Симметрия атома водорода

Рассмотрим, следуя [11], группу симметрии атома водорода. Как показано в работе [3], уравнение Шредингера в импульсном представлении

$$\frac{p^2}{2} \Psi(p) - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{\Psi(p')}{|p-p'|^2} d^3 p' = E \Psi(p) \quad (6.1)$$

имеет такие интегрируемые с квадратом модуля решения, которые в новых переменных ξ_i , $\xi_i^2 = 1$ ($i = 1, 2, 3, 4$):

$$\xi = \frac{2p_0}{p_0^2 + p^2} \mathbf{p}; \quad \xi_4 = \frac{p_0^2 - p^2}{p_0^2 + p^2}; \quad p_0 = \sqrt{-2E}, \quad (6.2)$$

являются гармоническими полиномами вектора ξ_i на четырехмерной сфере, т. е. удовлетворяют уравнению

$$\Delta_4 \varphi = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi_2^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi_3^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi_4^2} = 0. \quad (6.3)$$

Непосредственной проверкой можно убедиться, что 15 операторов, вид которых подсказан аналогией уравнения (6.3) с уравнением Клейна — Гордона с массой нуль, допускающим конформ-

ную группу симметрии, изоморфную $O(4,2)$:

$$I_i = \xi_k^2 \left(\frac{\partial}{\partial \xi_i} \right) - 2\xi_i \xi_k \frac{\partial}{\partial \xi_k} - 2\xi_i; \quad (6.4)$$

$$P_i = -i \frac{\partial}{\partial \xi_i}; \quad M_{ik} = -i \left(\xi_k \frac{\partial}{\partial \xi_k} - \xi_i \frac{\partial}{\partial \xi_i} \right); \quad I = \xi_k \frac{\partial}{\partial \xi_k} + 1,$$

коммутируют на решениях уравнения (6.3) с четырехмерным лапласианом. Составим из операторов (6.4) линейные комбинации:

$$L_{ik} = -L_{ki}, \quad i, k = 0, 1, 2, \dots, 5; \quad L_{ik} = M_{ik}, \quad i, k = 1, 2, 3, 4; \quad (6.5)$$

$$L_{i5} = 1/2 (I_i + iP_i); \quad L_{i0} = 1/2 (P_i + iI_i); \quad L_{50} = -I,$$

удовлетворяющие стандартным коммутационным соотношениям алгебры Ли $O(4,2)$:

$$[L_{ik}, L_{lm}] = i(\delta_{il}L_{km} + \delta_{km}L_{il} - \delta_{im}L_{kl} - \delta_{kl}L_{im}). \quad (6.6)$$

Эта совокупность операторов и определяет симметрию задачи в смысле, обсужденном в §§ 1, 3.

Собственные функции атома водорода, отвечающие главному квантовому числу N , образуют базис конечномерного неприводимого представления компактной $O(4)$ -группы (с генераторами M_{ik}).

Как хорошо известно, каждый вектор этого базиса полностью определяется заданием двух аддитивных квантовых чисел ν_1 и ν_2 , которые являются собственными числами операторов $(M_{14} + M_{23})/2$, $(M_{23} - M_{14})/2$ и пробегают все (или целые, или полужелые) значения в области

$$\begin{aligned} -(N-1)/2 &\leq \nu_1 \leq (N-1)/2; \\ -(N-1)/2 &\leq \nu_2 \leq (N-1)/2. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Собственные функции атома водорода, отвечающие главному квантовому числу $N = n + 1$, можно реализовать как неприводимые тензорные степени $\Pi_{i_1, i_2, \dots, i_n}$ вектора ξ_i , причем этот тензор полностью симметричен по любой перестановке индексов и его свертка по любой паре индексов равна нулю. Так, при $N = 1$ $\Pi^0 = 1$; при $N = 2$ имеем четыре функции: $\Pi_1^{(1)} = -2\xi_1$, $\Pi_2^{(1)} = -2\xi_2$, $\Pi_3^{(1)} = -2\xi_3$, $\Pi_4^{(1)} = -2\xi_4$; при $N = 3$ тензор $\Pi_{ik}^{(2)}$ имеет вид, пропорциональный $\xi_i \xi_k - \xi_m^2 \delta_{ik}/4$. Операторы (6.4) содержат дифференцирование по всем четырем переменным ξ_i . Волновые функции состояний атома водорода получаются из тензора $\Pi_{i_1, \dots, i_n}^{(n)}$ при условии $\xi_i^2 = 1$. Однако, чтобы получить $O(4,2)$ -представление алгебры, используем такой прием: будем пока считать эти переменные независимыми. Тогда матричные элементы операторов

(6.4) в базисе $\Pi_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}$ имеют вид [11]

$$I_i \Pi_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)} = \delta_{i, i_{n+1}} \Pi_{i_1, i_2, \dots, i_n, i_{n+1}}^{(n+1)}$$

$$P_i \Pi_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)} = i \left[2n \sum_{k=1}^n \delta_{i, i_k} \Pi_{i_1, \dots, i_{k-1}, i_{k+1}, \dots, i_n}^{(n)} - \right. \\ \left. - 2 \sum_{(j, k)=1}^n \delta_{i_j, i_k} \Pi_{i_1, \dots, i_{j-1}, i_{j+1}, \dots, i_{k-1}, i_{k+1}, \dots, i_n}^{(n)} \right]; \\ I \Pi_{i_1, \dots, i_n}^{(n)} = (n+1) \Pi_{i_1, \dots, i_n}^{(n)}; \\ M_{ij} \Pi_{i_1, \dots, i_n}^{(n)} = i \left[\sum_{k=1}^n \delta_{i, i_k} \Pi_{i_1, \dots, i_{k-1}, i_{k+1}, \dots, i_n}^{(n)} - \right. \\ \left. - \delta_{j, i_k} \Pi_{i_1, \dots, i_{k-1}, i_{k+1}, \dots, i_n, i}^{(n)} \right]. \quad (6.8)$$

Здесь символ (j, k) означает суммирование по всем сочетаниям из n индексов по два.

Теперь будем рассматривать эти формулы для определения того, как действуют операторы I_i , P_i , M_{ik} , I на волновые функции атома водорода, — иными словами, будем считать, что в правой и левой частях равенств (6.8) в $\Pi_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}$ принято $\xi_i^2 = 1$. Новые, таким образом определенные операторы удовлетворяют тем же самым коммутационным соотношениям, что и дифференциальные операторы (6.4). В этом можно легко убедиться непосредственной проверкой.

Следовательно, формулы (6.8) при $\xi_i^2 = 1$ задают представление алгебры операторов (6.4). Операторы I_i переводят уровень N в $N+1$, а операторы P_i — в $N-1$. Это означает, что из любого состояния последовательно можно получить всю совокупность состояний атома водорода. $O(4)$ -симметрия позволяет по одной волновой функции узнать все волновые функции, принадлежащие одному уровню. Более широкая $O(4,2)$ -симметрия позволяет восстановить и все функции, принадлежащие любым другим уровням.

Таким образом, в пространстве $\Pi = \sum \oplus \Pi_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{(n)}$, где $\sum \oplus$ — прямая сумма пространств функций, отвечающих данному N , построено бесконечномерное представление алгебры операторов (6.4) или их линейных комбинаций (6.5). В силу формул (6.8) базис пространства Π можно получить, последовательно действуя на единицу оператором I_i . Докажем, что представление неприводимо. Действительно, если бы существовало ненулевое инвариантное подпространство \tilde{H} относительно всех операторов (6.5), то оно было бы инвариантно и относительно компактной подалгебры операторов M_{ik} . Как хорошо известно, представление компактной алгебры распадается в прямую сумму неприводимых представлений. Следовательно, в \tilde{H} содержится хотя бы одна тензор-

ная степень $\Pi_{i_1, i_2, \dots, i_k}^{(k)}$. Действуя последовательно на $\Pi_{i_1, \dots, i_k}^{(k)}$ оператором P_i , в конечном итоге получим единицу, а как отмечалось выше, пространство H натянута на единицу.

Таким образом, пространство \tilde{H} совпадает с H . Этим полностью доказана неприводимость представления алгебры $O(4,2)$ в пространстве H .

Нетрудно проверить, что операторы Казимира для написанного представления принимают следующие значения:

$$\begin{aligned} C_2 &= L_{ik}L_{ki} = 6; & C_3 &= \varepsilon_{iklmnp}L_{ik}L_{lm}L_{np} = 0; \\ C_4 &= L_{ik}L_{km}L_{mn}L_{ni} = -12. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Алгебра $O(4,2)$ содержит подалгебру де Ситтера $S \approx O(4,1)$, состоящую из операторов L_{ij} , где $i, j = 1, \dots, 5$. Замечательно, что построенное выше представление остается неприводимым и относительно подалгебры $O(4,1)$. Вычислим операторы Казимира этой подалгебры:

$$\begin{aligned} Q &= L_{ij}L_{ji} = 4 - \frac{1}{2}(\xi_i^2 + 1)^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi_k^2}; \\ W &= W_\alpha W^\alpha = 0; & W_\alpha &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta\mu} L_{\beta\gamma} L_{\delta\mu}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Следовательно, $Q\Pi_{i_1, \dots, i_n}^{(n)} = 4\Pi_{i_1, \dots, i_n}^{(n)}$. Это указывает на неприводимость представления алгебры $O(4,1)$. Полное доказательство неприводимости этого представления аналогично вышеизложенному доказательству неприводимости представления алгебры $O(4,2)$.

На первый взгляд может показаться, что в проведенном рассмотрении динамической симметрии $O(4,2)$ атома водорода имеется противоречие. Действительно, операторы (6.4) переводят решения уравнения (6.3) в новые решения этого же уравнения, но переводят ли они решения уравнения (6.1) в решения этого же уравнения?

Этот вопрос разрешается следующим образом. Операторы (6.4) не переводят решения уравнения (6.1) в решения этого же уравнения. Однако новые операторы, имеющие матричные элементы, задаваемые формулами (6.8), уже обладают таким свойством, при этом они удовлетворяют коммутационным соотношениям (6.6) и операторы Казимира для этих операторов имеют значения, даваемые формулами (6.9).

Таким образом, при построении динамической группы симметрии $O(4,2)$ атома водорода мы поступим следующим образом. Сначала в соответствии с [3] сводим уравнение Шредингера для дискретных состояний атома водорода в импульсном представлении к четырехмерному уравнению Лапласа. Затем используем известное свойство конформной инвариантности этого уравнения и явный вид генераторов конформной группы для построения в явном виде матричных элементов операторов представления группы

$O(4,2)$, действующих уже на дискретных состояниях атома водорода, т. е. на решениях уравнения (6.1). Таким образом, уравнение (6.3) и генераторы (6.4) используются как вспомогательный прием для нахождения операторов группы $O(4,2)$ (в матричном виде), действующих в пространстве стационарных состояний атома водорода. Другие реализации этого представления группы $O(4, 2)$ в пространстве состояний дискретного спектра атома водорода построены в работах [12—16].

§ 7. Динамическая симметрия для нерелятивистской частицы в магнитном поле

Рассмотрим сначала нерелятивистскую частицу со спином $1/2$ в однородном магнитном поле, следуя обычному изложению [52, 53]. Гамильтониан, описывающий поведение частицы в этом случае, имеет вид

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 - \mu\sigma H \quad (c = \hbar = 1), \quad (7.1)$$

где $\mathbf{A} = [\mathbf{H} \times \mathbf{r}]/2$; μ — магнитный момент частицы; σ — матрицы Паули.

Удобно в дальнейшем ввести новые переменные:

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{x + iy}{2} \sqrt{m\omega}; & \xi^* &= \frac{x - iy}{2} \sqrt{m\omega}; \\ x &= \frac{\xi + \xi^*}{\sqrt{m\omega}}; & y &= -i \frac{\xi - \xi^*}{\sqrt{m\omega}}; \end{aligned} \quad (7.2)$$

здесь частота ω задается формулой

$$\omega = eH/m, \quad (7.3)$$

а магнитное поле направлено по оси z . Легко видеть, что операторы проекции импульса p_z , проекции момента $M_z = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]_z$, а также проекции спина σ_z и координаты «центра окружности»

$$x_0 = x + (p_y - eA_y)/m\omega; \quad y_0 = y - (p_x - eA_x)/m\omega \quad (7.4)$$

коммутируют с гамильтонианом (7.1) и являются интегралами движения. Следуя работе [52], где применялся метод факторизации Шредингера [54, 55], введем два вида операторов — уничтожения и рождения:

$$\begin{aligned} a &= [p_x - eA_x - i(p_y - eA_y)](2m\omega)^{-1/2}; \\ a^\dagger &= [p_x - eA_x + i(p_y - eA_y)](2m\omega)^{-1/2}, \end{aligned} \quad (7.5)$$

и коммутирующие с гамильтонианом (7.1) операторы

$$b = (x_0 - iy_0) \sqrt{m\omega/2}; \quad b^\dagger = (x_0 + iy_0) \sqrt{m\omega/2}. \quad (7.6)$$

В переменных ξ эти операторы имеют простой вид:

$$\begin{aligned} a &= -(i/\sqrt{2})(\xi + \partial/\partial\xi^*); & a^\dagger &= (i/\sqrt{2})(\xi^* - \partial/\partial\xi); \\ b &= (1/\sqrt{2})(\xi^* + \partial/\partial\xi); & b^\dagger &= (1/\sqrt{2})(\xi - \partial/\partial\xi^*). \end{aligned} \quad (7.7)$$

Легко проверить, что операторы a , a^\dagger , b , b^\dagger удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= [b, b^\dagger] = 1; \\ [a, b] &= [a, b^\dagger] = [a^\dagger, b] = [a^\dagger, b^\dagger] = 0. \end{aligned} \quad (7.8)$$

Используя эти операторы, легко переписать гамильтониан в виде

$$\mathcal{H} = \omega(a^\dagger a + 1/2) - \mu\sigma_z H + p_z^2/2m. \quad (7.9)$$

Так как операторы \mathcal{H} , p_z , σ_z коммутативны, собственные функции гамильтониана (7.9) можно представить в виде

$$\Psi_{E p_z s_z} = \Phi_{n_1}(\xi, \xi^*) \exp(ip_z z) \chi_{s_z}^{1/2}, \quad (7.10)$$

где $\chi_{s_z}^{1/2}$ — двухкомпонентный спинор, являющийся собственным вектором оператора σ_z : $\sigma_z \chi_{s_z}^{1/2} = 2s_z \chi_{s_z}^{1/2}$, а функция $\Phi_{n_1}(\xi, \xi^*)$ определяется уравнением

$$\omega(a^\dagger a + 1/2)\Phi_{n_1}(\xi, \xi^*) = E_t \Phi_{n_1}(\xi, \xi^*). \quad (7.11)$$

Очевидно, что спектр энергий дается формулой

$$E = E_t - 2\mu H s_z + p_z^2/2m. \quad (7.12)$$

Собственные функции $\Phi_{n_1}(\xi, \xi^*)$, удовлетворяющие уравнению (7.11), находятся следующим образом. Рассмотрим состояние $\Phi_{00}(\xi, \xi^*) = |0, 0\rangle$ такое, что

$$a\Phi_{00} = b\Phi_{00} = 0; \quad \int |\Phi_{00}|^2 dx dy = 1. \quad (7.13)$$

Используя вид операторов a и b (7.7), легко находим

$$\Phi_{00} = \sqrt{m\omega/2\pi} \exp(-|\xi|^2). \quad (7.14)$$

Определим состояния

$$\Phi_{n_1 n_2} = |n_1, n_2\rangle = \frac{(a^\dagger)^{n_1} (b^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} |0, 0\rangle, \quad (7.15)$$

тогда

$$\int \Phi_{n_1 n_2}^* \Phi_{m_1 m_2} dx dy = \delta_{n_1 m_1} \delta_{n_2 m_2}. \quad (7.16)$$

В переменных ξ

$$|n_1, n_2\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi}} \frac{i^{n_1} 2^{(n_1 - n_2)/2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} \left(\xi^* - \frac{\partial}{\partial\xi}\right)^{n_1} \xi^{n_2} \exp(-|\xi|^2). \quad (7.17)$$

Легко проверить, что

$$\omega(a^\dagger a + 1/2) |n_1, n_2\rangle = (n_1 + 1/2)\omega |n_1, n_2\rangle. \quad (7.18)$$

Таким образом,

$$E_t = \omega(n_1 + 1/2) \quad (7.19)$$

и каждое значение E_t бесконечнократно вырождено по числу n_2 . Отметим, что $|n_1, n_2\rangle$ суть собственные функции операторов M_z и $r_0^2 = x_0^2 + y_0^2$:

$$\begin{aligned} M_z |n_1, n_2\rangle &= (n_2 - n_1) |n_1, n_2\rangle; \\ r_0^2 |n_1, n_2\rangle &= \lambda |n_1, n_2\rangle. \end{aligned} \quad (7.20)$$

В случае электрона ($\mu = e/2m$) появляется дополнительное специфическое вырождение уровней энергии Ландау. Два состояния

$$|n_1 + 1, n_2, s_z = -1/2, p_z\rangle; \quad |n_1, n_2, s_z = 1/2, p_z\rangle \quad (7.21)$$

обладают одинаковой энергией. За это вырождение отвечает дополнительная спиральная симметрия гамильтониана (7.1). Рассмотрим операторы

$$\begin{aligned} \tilde{X}_1 &= (a\sigma_+ + a^\dagger\sigma_-)/2; & \tilde{X}_3 &= \sigma_3; \\ \tilde{X}_2 &= (a\sigma_+ - a^\dagger\sigma_-)/2i; & \sigma_\pm &= \sigma_x \pm i\sigma_y, \end{aligned} \quad (7.22)$$

которые коммутируют с гамильтонианом и операторами b, b^\dagger . На пространстве состояний с $n_1 > 0$ можно ввести нормированные операторы X_i , образующие алгебру $SU(2)$:

$$\begin{aligned} X_1 &= [a\sigma_+ (a^\dagger a)^{-1/2} + (a^\dagger a)^{-1/2} a^\dagger \sigma_-]/2; \\ X_2 &= [a\sigma_+ (a^\dagger a)^{-1/2} - (a^\dagger a)^{-1/2} a^\dagger \sigma_-]/2i; \\ X_3 &= \sigma_3. \end{aligned} \quad (7.23)$$

Эти операторы удовлетворяют соотношениям

$$[X_i, X_k] = 2i\epsilon_{ikl}X_l; \quad \{X_i, X_k\} = 2\delta_{ik}, \quad (7.24)$$

где фигурные скобки обозначают антикоммутатор.

На состояниях (7.21) реализуется спинорное представление спиральной $SU(2)$ -группы. На состояниях с $n_1 = 0, s_z = -1/2$ операторы X_1, X_2 аннулируются, и остается один оператор. Построенная алгебра операторов аналогична спиральной алгебре, найденной в работах для моделей релятивистского атома водорода и свободного уравнения Дирака [56].

Рассмотрим [359] пространство состояний D с фиксированным импульсом p_z и проекцией спина s_z . Базис в этом пространстве

образуют функции

$$\Psi_{E p_z s_z}^{n_1 n_2} = \Phi_{n_1 n_2}(\xi, \xi^*) \exp(ip_z z) \chi_{s_z}^{1/2}. \quad (7.25)$$

Рассмотрим алгебру операторов

$$\begin{aligned} A_{11} &= a^\dagger a; & A_{12} &= a^\dagger b; & A_{13} &= ia^\dagger (a^\dagger a + b^\dagger b + 1)^{1/2}; \\ A_{21} &= b^\dagger a; & A_{22} &= b^\dagger b; & A_{23} &= ib^\dagger (a^\dagger a + b^\dagger b + 1)^{1/2}; \\ A_{31} &= i(a^\dagger a + b^\dagger b + 1)^{1/2} a; & A_{32} &= i(a^\dagger a + b^\dagger b + 1)^{1/2} b; \\ A_{33} &= -(a^\dagger a + b^\dagger b + 1), \end{aligned} \quad (7.26)$$

удовлетворяющих коммутационным соотношениям

$$[A_{ik}, A_{lm}] = \delta_{kl} A_{im} - \delta_{im} A_{lk}. \quad (7.27)$$

Операторы (7.26) образуют алгебру $U(2,1)$. В пространстве D реализуется одно бесконечномерное унитарное неприводимое представление алгебры $U(2,1)$. Для этого представления операторы Казимира имеют вид

$$C_1 = A_{ii} = -1; \quad C_2 = A_{ik} A_{ki} = -1; \quad C_3 = A_{ik} A_{kl} A_{li} = -3. \quad (7.28)$$

Подалгебра операторов A_{ik} ($k = 2, 3$), коммутирующих с гамильтонианом (7.1), образует алгебру $U(1,1)$. В силу этого пространство состояний D_{n_1} , базисом в котором служат состояния (7.25) с фиксированными числами p_z, s_z, n_1 , является инвариантным подпространством относительно алгебры $U(1,1)$. Таким образом, все пространство D разбивается в прямую сумму подпространств D_{n_1} , базисом в которых являются состояния (7.25) с фиксированным n_1 :

$$D = \sum_{n_1=0}^{\infty} D_{n_1}. \quad (7.29)$$

В каждом подпространстве D_{n_1} реализуется одно неприводимое бесконечномерное унитарное представление алгебры $U(1,1)$ (дискретная серия, см. работы [57, 58]). Это легко следует из того, что операторы Казимира

$$C_0 = \sum_{i=2}^3 A_{ii}; \quad C_1 = \sum_{i, k=2}^3 A_{ik} A_{ki}$$

на подпространстве D_{n_1} имеют следующий вид:

$$C_0 = -n_1 - 1; \quad C_1 = n_1^2 + n_1 + 1. \quad (7.30)$$

Таким образом, в представление динамической алгебры $U(2,1)$, описывающее дискретную часть энергетического спектра задачи о заряженной частице в магнитном поле и задаваемое операторо-

рами Казимира (7.28), однократно входят все представления алгебры симметрии $U(1,1)$, задаваемые операторами Казимира (7.30). Следует отметить, что поскольку в $U(1,1)$ -группе существуют две картановские подгруппы — компактная и некомпактная, то возможна классификация состояний с заданной энергией при помощи компактной и некомпактной подгрупп. Собственные функции инфинитезимального оператора из компактной подгруппы дают состояния (7.25), а классификация по некомпактной подгруппе приводит к непрерывному спектру состояний.

Представляет интерес произвести классификацию состояний и по компактной $U(2)$ -подгруппе, образованной операторами A_{ik} ($i, k = 1, 2$), т. е. сузить представление $U(2,1)$ -группы (7.28) на компактную подгруппу. Представления $U(2)$ -группы задаются старшим весом (f_1, f_2) , где целые числа f_1 и f_2 удовлетворяют неравенству $f_1 \geq f_2$. Пространство состояний D разлагается в прямую сумму подпространств:

$$D = \sum_{f_1 f_2} D_{f_1 f_2}. \quad (7.31)$$

В подпространстве $D_{f_1 f_2}$ реализуется конечномерное унитарное неприводимое представление $U(2)$ -группы (причем, как легко видеть, со старшим весом $f_1 = f, f_2 = 0$). Базисом для этого представления служат функции (7.25) с фиксированными p_z, s_z , причем индексы этих функций удовлетворяют условию $f = n_1 + n_2$.

Задачу о нахождении динамики поведения обсуждаемой модели можно сформулировать, как и задачу о спектре, в рамках $U(2,1)$ -группы. Для этого заметим, что операторы координат x и y можно выразить через операторы рождения и уничтожения по формулам

$$\begin{aligned} x &= (2m\omega)^{-1/2} [b + b^\dagger + i(a - a^\dagger)]; \\ y &= (2m\omega)^{-1/2} [i(b - b^\dagger) + a + a^\dagger], \end{aligned} \quad (7.32)$$

а операторы дипольного момента выражаются через генераторы $U(2,1)$ -группы:

$$\begin{aligned} d^+ &= -e\xi/\sqrt{2} = -e(m\omega)^{-1/2} [-(A_{33})^{-1/2} A_{31} - iA_{23} (-A_{33})^{-1/2}]; \\ d^- &= -e\xi^*/\sqrt{2} = e(m\omega)^{-1/2} [-i(-A_{33})^{-1/2} A_{32} - A_{13} (-A_{33})^{-1/2}]. \end{aligned} \quad (7.33)$$

Эта связь аналогична связи оператора дипольного перехода с генераторами $O(4,2)$ -группы в атоме водорода [15]. Переход к случаю нерелятивистской частицы со спином 0 прост ($\mu = 0$ в (7.1)). Поэтому представление, описывающее состояние частицы с фиксированным p_z , является тем же представлением $U(2,1)$ -группы (см. (7.26) и (7.28)).

§ 8. Симметрия кулоновского потенциала в n -мерном пространстве

Рассмотрим уравнение

$$\Delta_n \varphi = 0; \quad \Delta_n = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}. \quad (8.1)$$

Координаты x_i могут быть действительными и мнимыми, т. е. в операторе Δ_n произвольное число знаков плюс и минус. Непосредственной проверкой убеждаемся, что операторы

$$P_i = -i \frac{\partial}{\partial x_i}; \quad I_i = x_k^2 \frac{\partial}{\partial x_i} - 2x_i x_k \frac{\partial}{\partial x_k} + (2 - n) x_i; \quad (8.2)$$

$$M_{ik} = -i \left(x_i \frac{\partial}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial}{\partial x_i} \right); \quad I = x_k \frac{\partial}{\partial x_k} + \frac{n}{2} - 1$$

коммутируют на решениях (8.1) с лапласианом Δ_n . Коммутационные соотношения следующих линейных комбинаций:

$$\begin{aligned} L_{ik} &= -L_{ki}, \quad i, k = 1, 2, \dots, n+2; \\ L_{ik} &= M_{ik}, \quad i, k = 1, \dots, n; \end{aligned} \quad (8.3)$$

$$L_{i, n+1} = (I_i + iP_i)/2; \quad L_{n+1, n+2} = -I;$$

$$L_{i, n+2} = (P_i + iI_i)/2,$$

совпадают с коммутационными соотношениями операторов $O(n, 2)$ -группы. Интересно, что одномерное уравнение Лапласа, имеющее группу симметрии $O(3)$, реализует в качестве решений лишь представления этой группы, задаваемые полным моментом $1/2$. Оператор Казимира $M^2 = 3/4$ тождественно. Представление конечномерно ($e_1 = 1, e_2 = x$). Операторы Казимира тождественно равны числам и в случае двумерного лапласиана. Многомерная кулоновская задача описывается гамильтонианом

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n+1} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \frac{1}{(x_i^2)^{1/2}}. \quad (8.4)$$

Дискретный спектр этой задачи и волновые функции были найдены в [59]. В работе [36] было показано, что задача обладает $O(n+1)$ -группой инвариантности. Точно так же, как и для трехмерного случая, многомерная кеплеровская задача сводится (см. работу [36]) с помощью перехода к импульсному пространству и стереографического проектирования к уравнению (8.1) в пространстве $n+1$ измерения. Однородные полиномы степени k принадлежат вырожденным уровням энергии $E_k = -\{2[k + (n-1)/2]^2\}^{-1}$. В пространстве этих полиномов реализуется конечномерное представление $O(n+1)$ -группы. Решения этой задачи

можно объединить с помощью (8.3) в одно неприводимое представление $O(n+1, 2)$ -группы. Это представление неприводимо при сужении на $O(n+1, 1)$ -подгруппу. Динамическая $O(n+1, 2)$ -группа для многомерного атома водорода была найдена в работах [11, 28, 31, 60].

§ 9. Когерентные состояния одномерного квантового осциллятора

Рассмотрим в настоящем параграфе важное представление, называемое часто представлением когерентных состояний.

Глаубер [61] ввел термин «когерентные состояния» и рассмотрел эти состояния для одномерного стационарного квантового осциллятора в связи с задачами квантовой оптики. По существу, такие состояния — волновые пакеты — строились и изучались еще Шредингером [62] для установления связи между классическими и квантовыми подходами. Когерентные состояния очень тесно связаны с представлением Фока — Баргмана [63, 64].

Чтобы изучить свойства представления когерентных состояний, рассмотрим одномерный квантовый осциллятор с гамильтонианом $\mathcal{H} = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$. Введем два оператора:

$$\begin{aligned} a &= (2\hbar)^{-1/2}(\lambda x + i\lambda^{-1}p); \\ a^\dagger &= (2\hbar)^{-1/2}(\lambda x - i\lambda^{-1}p), \quad \lambda = \sqrt{m\omega}. \end{aligned} \quad (9.1)$$

Эти операторы удовлетворяют коммутационному соотношению

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (9.2)$$

Неэрмитов оператор a обладает комплексными собственными значениями. Основное состояние осциллятора определяется из условия

$$a |0\rangle = 0. \quad (9.3)$$

Волновая функция в x -представлении имеет вид

$$\Psi_0(x) = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4} \exp\left[-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right)^2/2\right]. \quad (9.4)$$

В этом состоянии произведение неопределенностей координат и импульсов минимально: $\Delta p \Delta x = \hbar/2$. Когерентное состояние определяется как собственное состояние оператора уничтожения

$$a | \alpha \rangle = \alpha | \alpha \rangle. \quad (9.5)$$

Если решить дифференциальное уравнение первого порядка (9.5), то можно найти явный вид нормированного когерентного состояния:

$$| \alpha \rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \alpha\right)^2 + \frac{\alpha^2}{2} - \frac{|\alpha|^2}{2}\right]. \quad (9.6)$$

Это состояние может быть получено из основного состояния (9.4) с помощью оператора сдвига $D(\alpha)$:

$$D(\alpha) = \exp(\alpha a^\dagger - \alpha^* a). \quad (9.7)$$

Оператор сдвига $D(\alpha)$ унитарен и обладает свойствами

$$D^\dagger(\alpha) = D^{-1}(\alpha) = D(-\alpha); \quad D(\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a}. \quad (9.8)$$

Кроме того, этот оператор сдвигает операторы a и a^\dagger на комплексные числа:

$$D^{-1}(\alpha) a D(\alpha) = a + \alpha; \quad D^{-1}(\alpha) a^\dagger D(\alpha) = a^\dagger + \alpha^*. \quad (9.9)$$

Закон умножения операторов сдвига $D(\alpha)$ таков:

$$D(\alpha) D(\beta) = D(\alpha + \beta) \exp[i^{1/2}(\alpha\beta^* - \alpha^*\beta)]. \quad (9.10)$$

Когерентное состояние $|\alpha\rangle$ получается из (9.4) следующим образом:

$$|\alpha\rangle = D(\alpha) |0\rangle. \quad (9.11)$$

Когерентное состояние $|\alpha\rangle$ можно найти в виде разложения по нормированным стационарным состояниям осциллятора (фоковским состояниям) $|n\rangle$, удовлетворяющим условию $a^\dagger a |n\rangle = n |n\rangle$:

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (9.12)$$

Легко вычислить скалярное произведение двух когерентных состояний (9.6):

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle\beta|x\rangle \langle x|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2} - \frac{|\beta|^2}{2} + \alpha\beta^*\right). \quad (9.13)$$

Это означает, что когерентные состояния неортогональны. Модуль скалярного произведения равен

$$|\langle\beta|\alpha\rangle|^2 = \exp(-|\alpha - \beta|^2). \quad (9.14)$$

Эта величина мала, если $|\alpha - \beta|^2 \gg 1$, т. е. если комплексные числа α и β достаточно далеко лежат друг от друга. Величина $d^2\alpha$ связана с элементом фазового объема:

$$\pi^{-1} d^2\alpha \equiv \pi^{-1} d(\operatorname{Re} \alpha) d(\operatorname{Im} \alpha) = (2\pi\hbar)^{-1} dp dx. \quad (9.15)$$

Фоковские состояния $|n\rangle$ образуют полную систему функций

$$\sum_{n=0}^{\infty} \langle x|n\rangle \langle n|x'\rangle = \delta(x - x'). \quad (9.16)$$

Легко показать, что когерентные состояния также образуют полную систему функций

$$\pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \alpha | x \langle \alpha | x' \rangle d^2 \alpha = \delta(x - x'). \quad (9.17)$$

Любое состояние $|f\rangle$ может поэтому быть разложено по когерентным состояниям:

$$|f\rangle = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} |\alpha\rangle \langle \alpha | f \rangle d^2 \alpha. \quad (9.18)$$

Когерентные состояния не являются линейно независимыми. Так, одно когерентное состояние $|\alpha\rangle$ может быть выражено через другие состояния:

$$|\alpha\rangle = \pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} |\beta\rangle \exp\left(\beta^* \alpha - \frac{|\alpha|^2}{2} - \frac{|\beta|^2}{2}\right) d^2 \beta. \quad (9.19)$$

Таким образом, когерентные состояния образуют переполненную систему функций, и поэтому разложение по ним не является однозначным. Матричные элементы оператора сдвига $D(\alpha)$ относительно состояний $|n\rangle$ легко вычисляются и выражаются через полиномы Лагерра:

$$D_{mn}(\alpha) = \langle m | D(\alpha) | n \rangle; \\ D_{mn}(\alpha) = \begin{cases} \left(\frac{n!}{m!}\right)^{1/2} \alpha^{m-n} e^{-|\alpha|^2/2} L_n^{m-n}(|\alpha|^2), & m \geq n; \\ \left(\frac{m!}{n!}\right)^{1/2} (-\alpha^*)^{n-m} e^{-|\alpha|^2/2} L_m^{n-m}(|\alpha|^2), & m \leq n. \end{cases} \quad (9.20)$$

Имеют место также следующие соотношения:

$$\pi^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d^2 \alpha D_{ik}(\alpha) D_{mn}^\dagger(\alpha) = \delta_{km} \delta_{in}. \quad (9.21)$$

Любой оператор A может быть также разложен по когерентным состояниям:

$$A = \pi^{-2} \int |\alpha\rangle \bar{A}(\alpha^*, \beta) \langle \beta | \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2} - \frac{|\beta|^2}{2}\right) d^2 \alpha d^2 \beta. \quad (9.22)$$

Здесь $\bar{A}(\alpha^*, \beta) = \langle \alpha | A | \beta \rangle$.

Можно ввести, кроме обычных когерентных состояний, четные и нечетные когерентные состояния. Для этого рассмотрим не простой осциллятор, обсуждавшийся в § 4, а осциллятор с непроницаемой стенкой в начале координат.

Операторы a и a^\dagger под действием оператора инверсии координат I ведут себя следующим образом:

$$I a I = -a; \quad I a^\dagger I = -a^\dagger. \quad (9.23)$$

Из оператора a можно построить два оператора:

$$A = a^2; \quad A^\dagger = (a^\dagger)^2, \quad (9.24)$$

коммутирующие с оператором I .

Когерентное состояние осциллятора $|\alpha\rangle$, являющееся собственным состоянием оператора a , получается из основного состояния действием вейлевского оператора сдвига $D(\alpha)$. Оператор $D(\alpha)$ не инвариантен относительно замены знака координаты:

$$ID(\alpha)I = D(-\alpha). \quad (9.25)$$

Можно построить два оператора, реализующих неприводимые представления группы, состоящей из двух элементов — единичного и инверсии I : оператор

$$\text{ch}(\alpha a^\dagger - \alpha^* a) = 1/2[D(\alpha) + D(-\alpha)], \quad (9.26)$$

реализующий единичное представление, а также оператор

$$\text{sh}(\alpha a^\dagger - \alpha^* a) = 1/2[D(\alpha) - D(-\alpha)], \quad (9.27)$$

реализующий второе неприводимое представление этой группы. Собственные функции операторов (9.26) и (9.27) являются четными и нечетными соответственно, причем свойства четности этих функций относительно координаты x такие же, как и относительно координаты α . Таким образом, всегда можно ввести четное $|\alpha_+\rangle$ и нечетное $|\alpha_-\rangle$ когерентные состояния:

$$|\alpha_+\rangle = 1/2(|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle); \quad |\alpha_-\rangle = 1/2(|\alpha\rangle - |-\alpha\rangle), \quad (9.28)$$

причем эти состояния всегда ортогональны:

$$\langle\beta_-|\alpha_+\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{\beta_-}^*(x) \Psi_{\alpha_+}(x) dx = 0. \quad (9.29)$$

Проекционные операторы

$$P_+(\alpha) = |\tilde{\alpha}_+\rangle \langle\tilde{\alpha}_+|; \quad P_-(\beta) = |\tilde{\beta}_-\rangle \langle\tilde{\beta}_-|, \quad (9.30)$$

где $|\tilde{\alpha}_+\rangle = N_+(|\alpha\rangle)|\alpha_+\rangle$, $|\tilde{\beta}_-\rangle = N_-(|\beta\rangle)|\beta_-\rangle$ — нормированные состояния

$$N_{\pm}(|\alpha\rangle) = \{1/2[1 \pm \exp(-2|\alpha|^2)]\}^{-1/2}, \quad (9.31)$$

обладают свойствами

$$P_{\pm}^\dagger = P_{\pm}; \quad P_{\pm}^2 = P_{\pm}; \quad P_+P_- = P_-P_+ = 0. \quad (9.32)$$

Состояния $|\alpha\rangle$ образуют полную систему функций

$$\pi^{-1} \int d(\text{Re } \alpha) d(\text{Im } \alpha) |\alpha\rangle \langle\alpha| = E, \quad (9.33)$$

где единичный оператор E действует в гильбертовом пространстве интегрируемых с квадратом модуля функций. Состояния $|\alpha_+\rangle$ и $|\alpha_-\rangle$ по отдельности образуют полные системы функций в

гильбертовых пространствах четных и нечетных функций:

$$\pi^{-1} \int d(\operatorname{Re} \alpha) d(\operatorname{Im} \alpha) |\alpha_{\pm}\rangle \langle \alpha_{\pm}| = E_{\pm}. \quad (9.34)$$

Связь (9.33) и (9.34) такая же, как и связь разложений в интеграл Фурье по системе функций $\exp(ikx)$, а также четных функций по системе функций $\cos kx$ и нечетных по системе $\sin kx$. Таким образом, единичную матрицу (9.33) можно представить в виде

$$E = \begin{pmatrix} E_+ & 0 \\ 0 & E_- \end{pmatrix}. \quad (9.35)$$

Заметим, что строить четные и нечетные когерентные состояния $|\alpha_+\rangle$ и $|\alpha_-\rangle$ можно, диагонализуя коммутирующие операторы I и A , поскольку

$$A|\alpha_{\pm}\rangle = \alpha^2|\alpha_{\pm}\rangle; \quad I|\alpha_{\pm}\rangle = \pm|\alpha_{\pm}\rangle. \quad (9.36)$$

Используя известное разложение

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (9.37)$$

легко написать соответствующие разложения для четных и нечетных когерентных состояний:

$$|\alpha_+\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n}}{\sqrt{2n!}} |2n\rangle; \quad (9.38)$$

$$|\alpha_-\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n+1}}{\sqrt{(2n+1)!}} |2n+1\rangle.$$

Следовательно, если известно состояние $|\alpha_+\rangle$ или $|\alpha_-\rangle$, то, умножая его на фактор $\exp(|\alpha|^2/2)$ и разлагая в степенной ряд по переменной α^2 , получим собственные четные (нечетные) функции квадратичного интеграла движения $N = a^\dagger a$.

Мы так подробно остановились на простых и очевидных свойствах четных и нечетных когерентных состояний, поскольку данные свойства переносятся на любую систему, описываемую в представлении когерентных состояний. Кроме того, проведенное разбиение когерентных состояний на четные и нечетные легко обобщить в том смысле, что можно применять к точке комплексной плоскости не только операции из небольшой группы инверсии, но и операции из произвольных групп, в частности группы трансляций, а также двумерных кристаллических групп. Действие таких групп на точку α приводит к разбиению всех когерентных состояний по представлениям рассматриваемой группы. Эти представления приводимы. Выделяя неприводимые компоненты, можно использовать хорошо разработанный аппарат теории представлений для доказательства ортогональности и полноты различных подсистем когерентных состояний. Именно эта схема и была применена при введении четных и нечетных когерентных состояний [65, 66].

Когерентные состояния и точные решения для простых нестационарных квантовых систем

§ 1. Когерентные состояния осциллятора с зависящей от времени частотой

С этого параграфа мы начинаем рассмотрение когерентных состояний нестационарных квантовых систем.

В настоящей главе будут подробно изучены простые, но важные в физических приложениях нестационарные квантовые системы, их изучение будет проводиться с помощью метода интегралов движения с существенным использованием представления когерентных состояний. Данный метод был предложен и использован в работах [67—84]. В следующей главе этот метод будет обобщен на произвольные квантовые системы, но цель настоящей главы — максимально подробно продемонстрировать свойства метода на легко обозримых и физически важных моделях. Сначала будет рассмотрена система с квадратичным гамильтонианом — нестационарный квантовый осциллятор с зависящими от времени произвольным образом частотами колебаний. Одномерный квантовый осциллятор с переменной частотой рассматривался в работе Хусими [85], который получил точное решение уравнения Шредингера, функцию Грина и матричные элементы оператора эволюции в виде рядов. Осциллятор с постоянной частотой, возбуждаемый нестационарной силой, рассматривался в работах Фейнмана [86] и Швингера [87]. В настоящем параграфе будут найдены все линейные интегралы движения этой системы, построены когерентные состояния и с их помощью определены амплитуды и вероятности переходов между энергетическими уровнями. Иным способом эта задача решается в [92, 186, 204].

Рассмотрим квантовую систему, описываемую гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \sum_{k=1}^N \left[\frac{p_k^2}{2M_k} + \frac{1}{2} M_k \Omega_k^2(t) x_k^2 \right], \quad (1.1)$$

где x_k — обычные канонические координаты, p_k — сопряженные им импульсы, частоты $\Omega_k(t)$ — произвольные непрерывные функции времени и M_k — соответствующие массы. Для простоты изложения положим $M_k = 1$; это означает переход к новым координатам $M_k^{1/2} x_k$, которые обозначаем по-прежнему через x_k .

Волновое уравнение имеет вид

$$\left\{ i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N [p_k^2 + \Omega_k^2(t) x_k^2] \right\} \Psi = 0 \quad (\hbar = 1).$$

Будем решать эту задачу методом интегралов движения. Для этого найдем все независимые интегралы движения. В эти операторы время уже входит явно и они не должны коммутировать с гамильтонианом. Операторы — интегралы движения — должны удовлетворять только тому условию, что полная производная по времени от них равна нулю. Это приводит к следствию, что квантовомеханическое среднее от таких операторов не зависит от времени. Равенство нулю полной производной по времени от оператора эквивалентно его коммутативности с оператором $i\partial/\partial t - \mathcal{H}$. Можно непосредственно убедиться, что операторы

$$A_k(t) = i 2^{-1/2} [\varepsilon_k(t) p_k - \dot{\varepsilon}_k(t) x_k]; \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (1.2)$$

где функции $\varepsilon_k(t)$ суть определенные решения уравнений

$$\dot{\varepsilon}_k + \Omega_k^2(t) \varepsilon_k = 0; \quad \varepsilon_k = |\varepsilon_k| \exp \left(i \int^t \frac{d\tau}{|\varepsilon_k|^2} \right), \quad (1.3)$$

коммутируют с оператором $i\partial/\partial t - \mathcal{H}$ и являются, таким образом, интегралами движения. Имеют место следующие коммутационные соотношения:

$$[A_k, A_l^\dagger] = \delta_{kl}; \quad [A_k, A_l] = [A_k^\dagger, A_l^\dagger] = 0. \quad (1.4)$$

По теореме Стоуна — фон Неймана $2N$ операторов A_k, A_k^\dagger ($k = 1, \dots, N$) образуют полный набор. Это утверждение получается как следствие условия, что у операторов координаты и импульса нет инвариантных подпространств. Операторы A_k и A_k^\dagger образованы как линейная комбинация операторов координат и импульсов (причем с помощью линейного преобразования, имеющего обратное), поэтому у набора всех операторов A_k и A_k^\dagger тоже нет инвариантных подпространств.

Уравнения (1.3) эквивалентны нелинейным уравнениям (эти нелинейные уравнения использованы в работах [89, 71])

$$\frac{d^2}{dt^2} |\varepsilon_k| + \Omega_k^2(t) |\varepsilon_k| - \frac{1}{|\varepsilon_k|^3} = 0. \quad (1.5)$$

Можно теперь строить когерентные состояния N -мерного осциллятора с зависящими от времени произвольным образом частотами как нормированные собственные состояния интегралов движения (1.2). Поскольку построение когерентных состояний базируется только на свойствах операторов A_k, A_k^\dagger , можно применить

всю технику и результаты, описанные в § 9 гл. I. Подчеркнем, однако, что мы отталкиваемся при построении когерентных состояний не от каких-то произвольных операторов с бозонными коммутационными соотношениями, а от операторов — интегралов движения. Это важнейший пункт подхода, проходящий красной нитью через все последующие главы. Определим унитарный оператор

$$D(\alpha) = \prod_{k=1}^N \exp(\alpha_k A_k^\dagger - \alpha_k^* A_k); \quad \alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_N), \quad (1.6)$$

где α_k — произвольные комплексные числа, и построим нормированное состояние

$$|0, t\rangle = \prod_{k=1}^N \pi^{-1/4} \varepsilon_k^{-1/2} \exp\left[i \frac{\dot{\varepsilon}_k(t) x_k^2}{2\varepsilon_k(t)}\right]; \quad A_k |0, t\rangle = 0. \quad (1.7)$$

Эта волновая функция удовлетворяет уравнению Шредингера с гамильтонианом (1.1) и условию нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{k=1}^N dx_k \left\{ \pi^{-1/2} |\varepsilon_k|^{-1} \exp\left[i \left(\frac{\dot{\varepsilon}_k(t)}{\varepsilon_k(t)} - \frac{\dot{\varepsilon}_k^*(t)}{\varepsilon_k^*(t)} \right) \frac{x_k^2}{2} \right] \right\} = 1. \quad (1.8)$$

Действуя на вакуумное состояние (1.7) унитарным оператором сдвига (1.6), получим явное выражение для волновой функции когерентного состояния:

$$|\alpha, t\rangle = \prod_{k=1}^N \pi^{-1/4} \varepsilon_k^{-1/2} \exp\left[\frac{i\dot{\varepsilon}_k}{2\varepsilon_k} \left(x_k - i \frac{V\sqrt{2}\alpha_k}{\dot{\varepsilon}_k} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\dot{\varepsilon}_k^*}{\dot{\varepsilon}_k} \alpha_k^2 + |\alpha_k|^2 \right) \right]. \quad (1.9)$$

Поскольку операторы A_k инвариантны, волновая функция автоматически удовлетворяет уравнению Шредингера, что можно проверить и непосредственным дифференцированием.

Имеют место следующие формулы:

$$A_k |\alpha, t\rangle = \alpha_k |\alpha, t\rangle, \quad (1.10)$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{k=1}^N dx_k \pi^{-1/2} |\varepsilon_k|^{-1} \exp\left[\frac{i\dot{\varepsilon}_k}{2\varepsilon_k} \left(x_k - i \frac{V\sqrt{2}\alpha_k}{\dot{\varepsilon}_k} \right)^2 - \right. \\ & \quad \left. - \frac{1}{2} \left(\frac{\dot{\varepsilon}_k^*}{\dot{\varepsilon}_k} \alpha_k^2 + |\alpha_k|^2 \right) - \frac{i\dot{\varepsilon}_k^*}{2\varepsilon_k^*} \left(x_k + i \frac{V\sqrt{2}\beta_k^*}{\dot{\varepsilon}_k^*} \right)^2 - \right. \\ & \quad \left. - \frac{1}{2} \left(\frac{\dot{\varepsilon}_k}{\dot{\varepsilon}_k^*} \beta_k^{*2} + |\beta_k|^2 \right) \right] = \prod_{k=1}^N \exp\left[\beta_k^* \alpha_k - \frac{1}{2} (|\alpha_k|^2 + |\beta_k|^2) \right]. \quad (1.11) \end{aligned}$$

Кроме того, выполняется соотношение полноты

$$\begin{aligned} \pi^{-N} \int \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{k=1}^N \pi^{-1/2} |\varepsilon_k|^{-1} \exp \left[\frac{i\dot{\varepsilon}_k}{2\varepsilon_k} \left(x_k - i \frac{V\sqrt{2}a_k}{\dot{\varepsilon}_k} \right)^2 - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \left(\frac{\dot{\varepsilon}_k^*}{\dot{\varepsilon}_k} \alpha_k^2 + \frac{\dot{\varepsilon}_k}{\dot{\varepsilon}_k^*} \alpha_k^{*2} \right) - |\alpha_k|^2 - \frac{i\dot{\varepsilon}_k^*}{2\varepsilon_k^*} \left(x_k' + i \frac{V\sqrt{2}a_k^*}{\dot{\varepsilon}_k} \right)^2 \right] d^2\alpha_k = \\ = \prod_{k=1}^N \delta(x_k - x_k'). \quad (1.12) \end{aligned}$$

Здесь под $d^2\alpha_k$ понимается произведение дифференциалов

$$d^2\alpha_k = d(\operatorname{Re} \alpha_k) d(\operatorname{Im} \alpha_k).$$

Когерентные состояния $|\alpha, t\rangle$ являются производящими функциями для собственных состояний самосопряженных операторов $I_k = A_k^\dagger A_k$, рассмотренных в [89]:

$$|\alpha, t\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n_1, \dots, n_N=0}^{\infty} \frac{a_1^{n_1} \dots a_N^{n_N}}{(n_1! \dots n_N!)^{1/2}} |n, t\rangle. \quad (1.13)$$

Функции $|n, t\rangle$ удовлетворяют условиям

$$I_k |n, t\rangle = n_k |n, t\rangle; \quad \langle m, t | n, t\rangle = \delta_{nm}. \quad (1.14)$$

Здесь $|\alpha|^2 = \sum_{k=1}^N |\alpha_k|^2$, $n = (n_1, n_2, \dots, n_N)$, а n_k — целые неотрицательные числа. Собственные состояния $|n, t\rangle$ строятся с помощью линейных интегралов движения A_k следующим образом:

$$|n, t\rangle = \prod_{k=1}^N |n_k, t\rangle = \prod_{k=1}^N \frac{(A_k^\dagger)^{n_k}}{(n_k!)^{1/2}} |0, t\rangle. \quad (1.15)$$

Явное выражение для собственных функций оператора I_k можно получить из явного выражения когерентного состояния $|\alpha, t\rangle$, если использовать производящую функцию для полиномов Эрмита [223, 88]. Разлагая в ряд по переменным α_k когерентное состояние $|\alpha, t\rangle$, получаем

$$|n, t\rangle = \prod_{k=1}^N \left(\frac{\dot{\varepsilon}_k^*}{2\varepsilon_k} \right)^{n_k/2} (n_k! \varepsilon_k \pi^{1/2})^{-1/2} \exp\left(\frac{i\dot{\varepsilon}_k}{2\varepsilon_k} x_k^2\right) H_{n_k}\left(\frac{x_k}{|\varepsilon_k|}\right). \quad (1.16)$$

Эти формулы являются тривиальным обобщением результатов Хусими, полученных для одномерного нестационарного квантового осциллятора [85]. Когерентное состояние $|\alpha, t\rangle$, а также собственные функции $|n, t\rangle$ оператора I_k для N -мерного нестационарного осциллятора получаются как произведение соот-

ветствующих состояний для одномерного осциллятора. Ясно, что когерентные состояния одномерного осциллятора с зависящей от времени частотой являются решениями гауссовского вида, т. е. экспонентой от квадратичной формы. Гауссовские пакеты для нестационарного одномерного осциллятора впервые были построены в работе [85], где также найдена функция Грина для такой системы. Используя когерентные состояния, легко получить эту функцию Грина для рассматриваемой многомерной системы с помощью соотношения полноты, вычисляя интеграл $\pi^{-N} \int \dots \int d^2\alpha | \alpha, x_2, t_2 \rangle \langle \alpha, x_1, t_1 |$. В результате вычисления этого интеграла получаем следующее выражение для функции Грина G :

$$G(x_2, t_2, x_1, t_1) = \prod_{k=1}^N (2\pi i \sin \gamma_k | \varepsilon_k(t_1) \varepsilon_k(t_2) |)^{-1/2} \times \\ \times \exp \left[-i (\sin \gamma_k)^{-1} Q_{k,2} Q_{k,1} + \frac{i}{2} \operatorname{ctg} \gamma_k (Q_{k,2}^2 + Q_{k,1}^2) + \right. \\ \left. + \frac{i}{4} \left(Q_{k,2}^2 \frac{d|\varepsilon_k|^2}{dt_2} - Q_{k,1}^2 \frac{d|\varepsilon_k|^2}{dt_1} \right) \right]. \quad (1.17)$$

Здесь $\gamma_k = \int_{t_1}^{t_2} |\varepsilon_k|^2 dt$; $Q_{k;1,2} = x_k |\varepsilon_k(t_{1,2})|^{-1}$, а вектор x является N -мерным вектором: $x = (x_1, \dots, x_N)$.

Чтобы выяснить физический смысл когерентных состояний $| \alpha, t \rangle$ и интегралов движения $A_k(t)$, рассмотрим их предельные выражения при стремлении частот колебаний $\Omega_k(t)$ к постоянным значениям Ω_k . Для простоты предположим, что функции $\Omega_k(t) = \Omega_k^{\text{in}}$ при временах $t < 0$ и $\Omega_k(t) = \Omega_k^{\text{f}}$ при $t \rightarrow \infty$, где $\Omega_k^{\text{in, f}}$ являются константами. Тогда в пределе $t \rightarrow \pm \infty$ существуют полные системы функций начальных когерентных состояний $| \alpha, \text{in} \rangle$ и конечных когерентных состояний $| \beta, \text{f} \rangle$, а также ортонормированные полные системы функций, являющихся собственными состояниями с заданными энергиями колебаний, начальными состояниями $| n, \text{in} \rangle$ и конечными состояниями $| m, \text{f} \rangle$. Между начальными и конечными состояниями происходят переходы, и можно рассчитать амплитуды этих переходов. Общее выражение для амплитуды перехода, связывающей начальное состояние $| \text{in} \rangle$ и конечное состояние $| \text{f} \rangle$, дается матричным элементом

$$T_{\text{in}}^{\text{f}} = \langle \text{f} | t \rightarrow \infty \rangle, \quad (1.18)$$

где $| t \rightarrow \infty \rangle$ есть предел при $t \rightarrow \infty$ состояния $| t \rangle$, которое имеет в качестве своего предельного состояния при отрицательных временах $t < 0$ начальное состояние $| \text{in} \rangle$. Можно выбрать такие начальные условия для решений уравнений (1.3) или (1.5), чтобы иметь корректные предельные значения при стремлении $t \rightarrow -\infty$ для когерентного состояния $| \alpha, t \rangle$ и фоковского состо-

яния $|n, t\rangle$, т. е.

$$\begin{aligned}\varepsilon_k(-\infty) &= (\Omega_k^{\text{in}})^{-1/2} \exp(i\Omega_k^{\text{in}} t); \\ \dot{\varepsilon}_k(-\infty) &= i(\Omega_k^{\text{in}})^{1/2} \exp(i\Omega_k^{\text{in}} t).\end{aligned}\quad (1.19)$$

Такой выбор начальных условий приводит к следующим предельным выражениям для интегралов движения $A_k(t)$:

$$A_k(-\infty) \equiv A_k^{\text{in}} = 2^{-1/2} [x_k(\Omega_k^{\text{in}})^{1/2} + ip_k(\Omega_k^{\text{in}})^{-1/2}] e^{i\Omega_k^{\text{in}} t}. \quad (1.20)$$

Тогда очевидно, что состояния $|\alpha, -\infty\rangle$ и $|n, -\infty\rangle$ будут совпадать с начальными состояниями $|\alpha, \text{in}\rangle$ и $|n, \text{in}\rangle$, построенными с помощью операторов (интегралов движения для стационарного осциллятора) A_k^{in} по тем же формулам, по каким строились состояния $|\alpha, t\rangle$ и $|n, t\rangle$ с помощью операторов $A_k(t)$.

Приведем явные выражения для начальных состояний $|\alpha, \text{in}\rangle$ и $|n, \text{in}\rangle$, относящихся к предельному случаю начальных частот Ω_k^{in} :

$$\begin{aligned}|\alpha, \text{in}\rangle &= \prod_{k=1}^N \left(\frac{\Omega_k^{\text{in}}}{\pi^{1/2}} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \Omega_k^{\text{in}} \left[x_k - \left(\frac{2}{\Omega_k^{\text{in}}} \right)^{1/2} \alpha_k e^{-i\Omega_k^{\text{in}} t} \right]^2 - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} i\Omega_k^{\text{in}} t + \frac{1}{2} (\alpha_k^2 e^{-2i\Omega_k^{\text{in}} t} - |\alpha_k|^2) \right\};\end{aligned}\quad (1.21)$$

$$\begin{aligned}|n, \text{in}\rangle &= \prod_{k=1}^N 2^{-n_k/2} \pi^{-1/4} \left(\frac{\Omega_k^{\text{in}}}{n_k!} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \Omega_k^{\text{in}} x_k^2 - \right. \\ &\quad \left. - i \left(n_k + \frac{1}{2} \right) \Omega_k^{\text{in}} t \right] H_{n_k} [x_k (\Omega_k^{\text{in}})^{1/2}].\end{aligned}\quad (1.22)$$

Эти состояния опять являются произведениями соответствующих состояний для одномерных осцилляторов. Конечные состояния $|\gamma, f\rangle$ и $|m, f\rangle$ даются теми же формулами (1.21) и (1.22) с соответствующей подстановкой $\Omega_k^{\text{in}} \rightarrow \Omega_k^f$. Когерентные состояния для осциллятора с зависящей от времени частотой описывают максимально классическое состояние в том же смысле, что и когерентные состояния стационарного гармонического квантового осциллятора с постоянной частотой.

В предыдущих параграфах обсуждался физический смысл собственных значений α_k^{in} операторов A_k^{in} при заданном k ; модуль $|\alpha_k|$ определяет классическую амплитуду колебаний в фазовой плоскости переменных (p_k, x_k) , а фаза $\varphi(\alpha_k)$ комплексного числа α_k является классической фазой колебаний рассматриваемого осциллятора. Классическое движение в фазовой плоскости переменных $(p_k (2\Omega_k^{\text{in}})^{-1/2}, x_k (\Omega_k^{\text{in}}/2)^{1/2})$ является движением по окружности с радиусом $|\alpha_k|$. Поскольку оператор $A_k(t)$ есть интеграл движения, то его собственные значения α_k в состоянии $|\alpha, t\rangle$ связаны с координатами начальной точки фазовой плоскости, откуда

началось классическое движение. Естественно, для переменной частоты $\Omega_k(t)$ это движение более сложно, чем движение по окружности, но если ввести зависящие от времени координаты

$$x'_k = x_k (|\varepsilon_k| 2^{1/2})^{-1}; \quad p'_k = 2^{-1/2} (p_k |\varepsilon_k| - x_k d|\varepsilon_k|/dt),$$

то из соотношения (1.3) очевидно, что в новых переменных мы опять имеем окружность радиуса $|\alpha_k|$. Для N -мерного осциллятора фазовое пространство является $2N$ -мерным, и в зависящих от времени координатах $x'_k, p'_k, k = 1, \dots, N$, мы будем иметь классическое движение по $2N$ -мерной сфере с радиусом $|\alpha|$. Начальная точка этого движения определяется $2N$ действительными числами, и имеется N комплексных интегралов движения $\alpha_k, k = 1, \dots, N$, — собственных значений несамосопряженных интегралов движения $A_k(t)$.

§ 2. Амплитуды перехода в нестационарном осцилляторе

Обратимся теперь к расчету амплитуд перехода (1.18). Для такого расчета необходимо выразить операторы $A_k(t)$ через конечные операторы A_k^f , относящиеся к постоянным частотам Ω_k^f . Имеем

$$A_{k(t)} = \xi_k(t) A_k^f + \eta_k(t) (A_k^f)^\dagger. \quad (2.1)$$

Здесь зависящие от времени комплексные функции $\xi_k(t)$ и $\eta_k(t)$ следующим образом выражаются через функцию $\varepsilon_k(t)$ и ее производную $\dot{\varepsilon}_k(t)$:

$$\xi_k(t) = \frac{1}{2} e^{-i\Omega_k^f t} [\varepsilon_k(t) (\Omega_k^f)^{1/2} - i\dot{\varepsilon}_k(t) (\Omega_k^f)^{-1/2}]; \quad (2.2)$$

$$\eta_k(t) = \frac{1}{2} e^{-i\Omega_k^f t} [\varepsilon_k(t) (\Omega_k^f)^{1/2} + i\dot{\varepsilon}_k(t) (\Omega_k^f)^{-1/2}].$$

Коммутационные соотношения (1.4) приводят к ограничению

$$|\xi_k|^2 - |\eta_k|^2 = 1, \quad (2.3)$$

которое, как можно убедиться прямой проверкой, удовлетворяется. Общее решение уравнений (1.3) в пределе $t \rightarrow \infty$ для постоянных частот Ω_k^f может быть записано в виде

$$\varepsilon_k^f = (\Omega_k^f)^{-1/2} \xi_k e^{i\Omega_k^f t} - (\Omega_k^f)^{-1/2} \eta_k e^{-i\Omega_k^f t}. \quad (2.4)$$

Здесь комплексные числа ξ_k и η_k являются константами. Следовательно, амплитуды перехода, которые мы хотим найти, полностью определяются этими константами ξ_k и η_k (поскольку решение волнового уравнения выражено через функции $\varepsilon_k(t)$).

Удобно ввести также компактный (θ_k) и некомпактный (δ_k) параметры с помощью следующих формул:

$$\cos \theta_k = 1 - 2 |\eta_k / \xi_k|^2; \quad \text{ch } \delta_k = |\xi_k|^2 + |\eta_k|^2. \quad (2.5)$$

В случае одномерного осциллятора с зависящей от времени частотой некомпактный параметр δ_k использовался в работе [72]. Решения $|\alpha, t\rangle$ и $|n, t\rangle$ для N -мерного осциллятора являются произведениями соответствующих решений для одномерного осциллятора, поэтому амплитуды переходов для N -мерного нестационарного осциллятора являются произведениями соответствующих амплитуд для одномерных осцилляторов.

Амплитуды переходов между различными энергетическими состояниями для одномерного квантового осциллятора были получены Хусими [85]. Выведем формулы для амплитуд переходов между когерентными состояниями. (Заметим, что, по существу, эти формулы содержатся в работе [85], где строится производящая функция с помощью гауссовских пакетов, но необходимо произвести некоторые дополнительные преобразования, чтобы перейти к нашим формулам.) Приведем результат для N -мерного осциллятора:

$$T_{\alpha}^{\gamma} = \prod_{k=1}^N (\xi_k)^{-1/2} \exp \left\{ \frac{1}{2} \left[\alpha_k^2 \frac{\eta_k^*}{\xi_k} + \alpha_k \gamma_k^* \frac{2}{\xi_k} - (\gamma_k^*)^2 \frac{\eta_k}{\xi_k} - |\alpha_k|^2 - |\gamma_k|^2 \right] \right\}. \quad (2.6)$$

Амплитуда перехода (2.6) между когерентными состояниями есть не что иное, как функция Грина осциллятора с переменной частотой в представлении когерентных состояний. Получается эта функция Грина интегрированием, соответствующим взятию скалярного произведения $\langle \gamma, f | \alpha \rangle$. При этом интеграл факторизуется в произведение одномерных интегралов, каждый из которых есть простой гауссовский интеграл типа

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2 + bx) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/4a}.$$

Имея амплитуду перехода между когерентными состояниями, можно получить все остальные амплитуды простым дифференцированием. В случае осциллятора это дифференцирование особенно просто, если использовать опять производящую функцию для полиномов Эрмита [88]. Для переходов из состояния с заданной энергией в когерентное состояние $|n, in\rangle \rightarrow |\gamma, f\rangle$ получаем следующее выражение для амплитуды:

$$T_n^{\gamma} = \prod_{k=1}^N i^{n_k} \left[\frac{(\eta_k^*/2\xi_k)^{n_k}}{n_k! \xi_k} \right]^{1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[|\gamma_k|^2 + (\gamma_k^*)^2 \frac{\eta_k}{\xi_k} \right] \right\} \times \\ \times H_{n_k} \left[\frac{-i\gamma_k^*}{(2\xi_k\eta_k^*)^{1/2}} \right]. \quad (2.7)$$

Для переходов из когерентного состояния в состояние с заданной энергией $|\alpha, \text{in}\rangle \rightarrow |m, \text{f}\rangle$ соответственно имеем

$$T_{\alpha}^m = \prod_{k=1}^N \left[\frac{(\eta_k/2\xi_k)^{m_k}}{m_k! \xi_k} \right]^{1/2} \exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\eta_k^*}{\xi_k} \alpha_k^2 - |\alpha_k|^2 \right) \right] H_{m_k} \left[\frac{\alpha_k}{(2\xi_k \eta_k)^{1/2}} \right]. \quad (2.8)$$

Функция $T_{\alpha}^m \exp [|\alpha|^2/2 + |\gamma|^2/2]$ является производящей функцией для полиномов Лежандра. Действительно (см. формулу (II. 5.1) в [88]),

$$\begin{aligned} \exp \left[\alpha^2 \frac{\eta^*}{2\xi} + \alpha\gamma^* \frac{1}{\xi} - (\gamma^*)^2 \frac{\eta}{2\xi} \right] &= \\ &= \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{p!} \left[\alpha^2 \frac{\eta^*}{2\xi} + \alpha\gamma^* \frac{1}{\xi} - (\gamma^*)^2 \frac{\eta}{2\xi} \right]^p = \\ &= \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{p!} \frac{\alpha^{2p}}{2^p} \exp(-ip\varphi_{\xi}) \sum_{q=-p}^p \left(-\frac{\gamma^*}{\alpha} \right)^{p+q} Y_p^q(\zeta) \quad (2.9) \end{aligned}$$

(мы для простоты опустили индекс k). Здесь трехмерный вектор ζ имеет координаты $\zeta = (-\cos \frac{1}{2}\theta; \sin \frac{1}{2}\theta \cos \varphi_{\eta}; -\sin \frac{1}{2}\theta \sin \varphi_{\eta})$ и $\cos \frac{1}{2}\theta = 1/|\xi|$. В другой форме ($p+q=m$, $p-q=n$) правая сторона равенства (2.9) имеет вид

$$\begin{aligned} \sum_{m, n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n (\gamma^*)^m}{m!} \exp \left[\frac{i}{2}(m-n)\varphi_{\eta} - \frac{i}{2}(m+n)\varphi_{\xi} \right] \times \\ \times P_{(m+n)/2}^{(m-n)/2} \left(\cos \frac{1}{2}\theta \right), \quad (2.10) \end{aligned}$$

где числа m и n имеют одинаковую четность.

Таким образом, амплитуда перехода T_n^m имеет вид

$$\begin{aligned} T_n^m &= \langle m, \text{f} | n, t \rightarrow \infty \rangle = \\ &= \prod_{k=1}^N \left(\frac{n_k!}{m_k! \xi_k} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{i}{2}(m_k - n_k)\varphi_{\eta_k} - \frac{i}{2}(m_k + n_k)\varphi_{\xi_k} \right] \times \\ &\quad \times P_{(m_k+n_k)/2}^{(m_k-n_k)/2} \left(\cos \frac{1}{2}\theta_k \right). \quad (2.11) \end{aligned}$$

Выражения для T_{α}^m , T_n^m (2.8), (2.11) являются функциями Грина, отвечающими переходу из состояния $|\alpha\rangle$ в состояние $|m\rangle$ и из состояния $|n\rangle$ в состояние $|m\rangle$ соответственно. Таким образом, выражение для T_n^m (2.11) есть функция Грина осциллятора с переменной частотой в дискретном базисе. В соответствии с обсуждением подобных величин в § 2 гл. I амплитуду T_n^m можно рассматривать как функцию распределения; для нее, в силу унитарности оператора эволюции, справедливы условия

$|T_n^m|^2 \leq 1$ (см. формулу (2.14) гл. I). Матричный элемент (2.11) является интегралом от полиномов Эрмита и квадратичной экспоненты следующего вида:

$$T_n^m \propto \int_{-\infty}^{\infty} H_m(\alpha x) H_n(\beta x) e^{-\gamma x^2} dx.$$

Выражение этого интеграла через полином Лежандра приведено в [88]. В другой форме для одномерного осциллятора эта амплитуда приведена в работе [85] (в виде ряда) и в работе [72].

Для вероятностей переходов между энергетическими состояниями легко получаем

$$W_n^m = \prod_{k=1}^N \frac{n_k!}{m_k! |\xi_k|} \left| P_{\binom{m_k - n_k}{m_k + n_k}}^{1/2} \left(\cos \frac{1}{2} \theta_k \right) \right|^2. \quad (2.12)$$

Это тривиальное обобщение результата для одномерного осциллятора на многомерный случай. Такое выражение вероятности перехода через полином Лежандра в одномерном случае было получено в работе [92].

§ 3. Когерентные состояния заряда в однородном переменном магнитном поле с векторным потенциалом $A = [H(t) \times r/2]$

В этом параграфе рассмотрим еще один случай квантовой системы, описываемой нестационарным квадратичным гамильтонианом, чье поведение задается опять функцией $\varepsilon(t)$, подчиняющейся классическому уравнению колебаний с переменной частотой [72].

Рассмотрим частицу с массой M и зарядом e , движущуюся в классическом электромагнитном поле с потенциалами

$$A(t) = [H(t) \times r/2]; \quad \Phi = e\chi(t) (x^2 + y^2)/2M, \quad (3.1)$$

где r — вектор, задающий координаты частицы, $H(t)$ — аксиально-симметричное, однородное, переменное во времени магнитное поле, $\chi(t)$ — произвольная функция t . Скалярный потенциал Φ соответствует аксиально-симметричному, зависящему от времени, однородному распределению плотности заряда, равной $-e\chi(t)/(2\pi M c^2)$. Такой потенциал рассматривался в работе [89]. В случае $\chi(t) = 0$ имеем переменное магнитное поле $H(t)$ и электрическое поле, связанное с изменениями этого магнитного поля. Выберем направление оси z вдоль магнитного поля H , тогда $A_z = 0$. Движение вдоль оси z является свободным. Поэтому часть гамильтониана, отвечающую этому движению, опустим. Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$\mathcal{H} = (2M)^{-1} [(p_x - eA_x)^2 + (p_y - eA_y)^2] + e\Phi \quad (\hbar = c = 1). \quad (3.2)$$

Зависящая от спина часть гамильтониана в этом параграфе не рассматривается. Потенциалы (3.1), удовлетворяющие уравнениям Максвелла, могут создаваться соответствующими распределениями плотности тока и зарядов. Обычно с хорошей точностью эти потенциалы описывают электромагнитное поле в соленоиде с переменным током.

Как и в предыдущем параграфе, найдем сперва линейные интегралы движения. Прямым расчетом можно проверить, что следующие два комплексных оператора являются такими интегралами движения:

$$A(t) = \frac{e^{-1/2}}{2} [\varepsilon(t)(p_x + ip_y) - iM\dot{\varepsilon}(t)(y - ix)] \exp\left[\frac{i}{2} \int^t \omega(\tau) d\tau\right]; \quad (3.3)$$

$$B(t) = \frac{e^{-1/2}}{2} [\varepsilon(t)(p_y + ip_x) - iM\dot{\varepsilon}(t)(x - iy)] \exp\left[-\frac{i}{2} \int^t \omega(\tau) d\tau\right].$$

Здесь $\omega(\tau) = eH(\tau)/M$ и функция $\varepsilon(t)$ есть решение (частное) уравнения

$$\ddot{\varepsilon} + \Omega^2(t)\varepsilon = 0; \quad \Omega^2(t) = \frac{1}{4}\omega^2(t) + \frac{e^2}{M^2}\chi(t). \quad (3.4)$$

Операторы (3.3) коммутируют с оператором $i\partial/\partial t - \mathcal{H}$; следовательно, $dA/dt = dB/dt = 0$. Чтобы получить не зависящие от времени коммутационные соотношения операторов A , A^\dagger и B , B^\dagger , выберем специальное решение уравнения (3.4):

$$\varepsilon(t) = |\varepsilon| \exp\left(i \frac{e}{M} \int^t |\varepsilon(\tau)|^{-2} d\tau\right). \quad (3.5)$$

Уравнение (3.4) сводится в этом случае к нелинейному уравнению (1.5) [71]:

$$\frac{d^2|\varepsilon|}{dt^2} + \Omega^2(t)|\varepsilon| - \left(\frac{e}{M}\right)^2 |\varepsilon|^{-3} = 0. \quad (3.6)$$

Имеют место следующие коммутационные соотношения:

$$[A, A^\dagger] = [B, B^\dagger] = e/|e|; \quad [A, B] = [A, B^\dagger] = 0. \quad (3.7)$$

Для частиц с противоположными знаками повышающие и понижающие операторы A , B и A^\dagger , B^\dagger меняются местами. Для простоты считаем $e > 0$.

В работе [89] был найден один самосопряженный квадратичный интеграл движения, который можно выразить через найденные инварианты (3.3) следующим образом:

$$K(t) = A^\dagger(t)A(t) + 1/2.$$

Вследствие аксиальной симметрии рассматриваемого электромагнитного потенциала, проекция углового момента на направление магнитного поля также является интегралом движения и ее можно

выразить через найденные интегралы движения A и B следующим образом:

$$L_z = B^\dagger B - A^\dagger A.$$

Чтобы выяснить физический смысл интегралов движения A и B в рассматриваемой задаче, исследуем их пределы (при $t \rightarrow -\infty$) для построенного магнитного поля. Здесь предполагается, что $H(t) = H_{in}$ и $\varphi(t) = 0$, если $t < 0$, так что $\Omega(t) = \omega_{in}/2$. В пределе $t \rightarrow -\infty$ выбираем в качестве решения уравнения (3.4) следующее выражение:

$$\varepsilon(-\infty) = \left(\frac{2}{H_{in}}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i}{2} \omega_{in} t\right); \quad \dot{\varepsilon}(-\infty) = \frac{i}{2} \omega_{in} \varepsilon(-\infty). \quad (3.8)$$

Причина такого выбора будет объяснена ниже. При начальных условиях (3.8) предел интегралов движения (3.3) при $t \rightarrow -\infty$ дается следующими формулами:

$$\begin{aligned} A_{in} &= (1/2 M \omega_{in})^{1/2} [y - y_0 - i(x - x_0)] \exp(i \omega_{in} t); \\ B_{in} &= (1/2 M \omega_{in})^{1/2} (x_0 - i y_0), \end{aligned} \quad (3.9)$$

где операторы $x_0 = x/2 + p_y/M \omega_{in}$; $y_0 = y/2 - p_x/M \omega_{in}$ — хорошо известные [53] координаты центра орбиты частицы, движущейся в постоянном магнитном поле.

Из соотношений (3.9) ясно, что собственные значения инварианта B_{in} определяют координаты центра орбиты в плоскости x, y , а собственные значения оператора $A_{in} \exp(i \omega_{in} t)$ задают текущие координаты центра волнового пакета. Следовательно, сам интеграл движения A_{in} связан с координатами начальной точки движения относительно заданного центра орбиты. Для классического движения существует четыре независимых интеграла движения в соответствии с четырьмя степенями свободы (движение в плоскости x, y), и то же самое имеет место и в квантовом случае.

Тем же способом, которым были введены когерентные состояния в предыдущих параграфах для N -мерного осциллятора с зависящими от времени частотами, можно ввести когерентные состояния для заряженной частицы, движущейся в зависящем от времени электромагнитном поле, определенном вектор-потенциалом (3.1). В этом случае имеется два понижающих оператора $A(t)$ и $B(t)$ и когерентные состояния задаются двумя числами α и β :

$$|\alpha, \beta, t\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2} - \frac{|\beta|^2}{2}\right) \sum_{n_1, n_2=0}^{\infty} \frac{\alpha^{n_1} \beta^{n_2}}{(n_1! n_2!)^{1/2}} |n_1, n_2; t\rangle, \quad (3.10)$$

где α и β — постоянные комплексные числа. Здесь состояния

$$|n_1, n_2; t\rangle = \frac{(A^\dagger)^{n_1} (B^\dagger)^{n_2}}{(n_1! n_2!)^{1/2}} |0, 0; t\rangle \quad (3.11)$$

являются решениями уравнения Шредингера $(i\partial/\partial t - \mathcal{H})\Psi = 0$ и в то же время являются собственными состояниями интегралов движения $K(t)$ и L_z :

$$\begin{aligned} K |n_1, n_2; t\rangle &= \left(n_1 + \frac{1}{2}\right) |n_1, n_2; t\rangle; \\ L_z |n_1, n_2; t\rangle &= (n_2 - n_1) |n_1, n_2; t\rangle. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Когерентные состояния (3.10) суть собственные состояния зависящих от времени инвариантов $A(t)$ и $B(t)$:

$$A(t) |\alpha, \beta; t\rangle = \alpha |\alpha, \beta; t\rangle; \quad B(t) |\alpha, \beta; t\rangle = \beta |\alpha, \beta; t\rangle. \quad (3.13)$$

Физический смысл собственных значений α и β обсуждался выше. Имеются два унитарных оператора сдвига:

$$\begin{aligned} D(\alpha) &= \exp(\alpha A^\dagger - \alpha^* A), \quad D^{-1}(\alpha) A D(\alpha) = A + \alpha; \\ D(\beta) &= \exp(\beta B^\dagger - \beta^* B), \quad D^{-1}(\beta) B D(\beta) = B + \beta, \end{aligned} \quad (3.14)$$

которые коммутируют друг с другом: $[D(\alpha), D(\beta)] = 0$. Явный вид когерентных состояний $|\alpha, \beta, t\rangle$ можно найти, действуя на вакуумное состояние

$$|0, 0; t\rangle = \left(\frac{e}{\pi}\right)^{1/2} \varepsilon^{-1} \exp\left(i \frac{M\dot{\varepsilon}}{2\varepsilon} \zeta \zeta^*\right) \quad (\zeta = x + iy) \quad (3.15)$$

операторами (3.14):

$$\begin{aligned} |\alpha, \beta; t\rangle &= D(\alpha) D(\beta) |0, 0; t\rangle = \\ &= \left(\frac{e}{\pi}\right)^{1/2} \varepsilon^{-1} \exp\left(i \frac{M\dot{\varepsilon}}{2\varepsilon} \zeta \zeta^*\right) \exp\left[-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2) + \right. \\ &\quad \left. + e^{1/2} |\varepsilon| (\beta \zeta e^{-i\gamma_-} + i\alpha \zeta^* e^{-i\gamma_+}) - i\alpha\beta e^{-i(\gamma_+ + \gamma_-)}\right], \end{aligned} \quad (3.16)$$

где фазы γ_{\pm} определяются следующими формулами:

$$\gamma_{\pm}(t) = \frac{e}{M} \int_0^t [|\varepsilon(\tau)|^{-2} \pm H(\tau)] d\tau.$$

Собственные состояния $|n_1, n_2; t\rangle$ операторов K и L_z ортонормированы:

$$\iint_{-\infty}^{\infty} dx dy \Psi_{n_1 n_2}^*(x, y, t) \Psi_{m_1 m_2}(x, y, t) = \delta_{n_1 m_1} \delta_{n_2 m_2}.$$

Имеет место следующее соотношение:

$$\begin{aligned} \frac{e}{\pi} \iint_{-\infty}^{\infty} |\varepsilon|^{-2} \exp\left[-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\alpha'|^2 + |\beta'|^2) + \right. \\ \left. + \frac{e^{1/2}}{|\varepsilon|} (\beta^* \zeta^* e^{i\gamma_-} - i\alpha^* \zeta e^{i\gamma_+} + i\alpha^* \beta^* e^{i(\gamma_+ + \gamma_-)} + \beta' \zeta e^{-i\gamma_-} + \right. \\ \left. + i\alpha' \zeta^* e^{-i\gamma_+} - i\alpha' \beta' e^{-i(\gamma_+ + \gamma_-)})\right] dx dy = \\ = \exp[\alpha^* \alpha' + \beta^* \beta' - \frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\alpha'|^2 + |\beta|^2 + |\beta'|^2)]. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Таким образом, когерентные состояния (3.16) ортонормированы, но не ортогональны. Можно ввести когерентные состояния по отношению к одному из операторов A или B .

Рассмотрим собственные состояния инвариантов K и B :

$$K |n_1, \beta; t\rangle = (n_1 + 1/2) |n_1, \beta; t\rangle; \quad B |n_1, \beta; t\rangle = \beta |n_1, \beta; t\rangle. \quad (3.18)$$

Легко проверить, что функции $|n_1, \beta; t\rangle = D(\beta) |n_1, 0; t\rangle$, явное выражение для которых имеет вид

$$|n_1, \beta; t\rangle = \left(\frac{e}{\pi n!}\right)^{1/2} i^{n_1} e^{-1} \left[\frac{e^{1/2}}{|\varepsilon|} \zeta^* - \beta e^{-i\gamma_-}\right]^{n_1} \times \\ \times \exp\left(i \frac{M\dot{\varepsilon}}{2\varepsilon} \zeta \zeta^* + \frac{e^{1/2}}{|\varepsilon|} \beta \zeta e^{-i\gamma_-} - i n_1 \gamma_+ - \frac{1}{2} |\beta|^2\right), \quad (3.19)$$

подчиняются условиям (3.18), а их скалярное произведение имеет вид

$$\langle n_1, \beta; t | m_1, \beta'; t \rangle = \delta_{n_1 m_1} \exp[\beta^* \beta' - \frac{1}{2} (|\beta|^2 + |\beta'|^2)]. \quad (3.20)$$

Когерентные состояния $|\alpha, n_2; t\rangle$ можно построить таким же способом: $|\alpha, n_2; t\rangle = D(\alpha) |0, n_2; t\rangle$. Когерентные состояния (3.19) являются производящей функцией для состояний $|n_1, n_2; t\rangle$, для которых можно получить явное выражение, разлагая их в ряд по степеням комплексного числа β , что дает тот же ответ, что и дифференцирование по переменным α и β когерентного состояния $|\alpha, \beta; t\rangle$. Имеем в результате следующее выражение:

$$|n_1, n_2; t\rangle = i^{n_1} (-1)^p \left[\frac{p! e \pi^{-1}}{(p + |n_1 + n_2|)!}\right]^{1/2} \left(\frac{e \rho^2}{|\varepsilon|^2}\right)^{|n_1 - n_2|/2} \times \\ \times \exp\left[i \frac{M\dot{\varepsilon}}{2\varepsilon} \rho^2 + i(n_2 - n_1) \varphi - i n_1 \gamma_+ - i n_2 \gamma_-\right] L_p^{|n_1 - n_2|} \left(\frac{e \rho^2}{|\varepsilon|^2}\right), \quad (3.21)$$

где целое число $p = (n_1 + n_2 - |n_1 - n_2|)/2$; φ и ρ — полярные координаты частицы, а $L_p^s(x)$ — полиномы Лагерра.

Когерентные состояния (3.16) образуют полную систему функций. Действительно, можно проверить, что

$$\pi^{-2} \int d^2\alpha d^2\beta \frac{e}{\pi} |\varepsilon|^{-2} \exp\left[-|\alpha|^2 - |\beta|^2 + i \frac{M\dot{\varepsilon}}{2\varepsilon} \zeta_1 \zeta_1^* + \frac{\sqrt{e}}{|\varepsilon|} \times \right. \\ \times (\beta \zeta_1 e^{-i\gamma_-} + i \alpha \zeta_1^* e^{-i\gamma_+} - i \alpha \beta e^{-i(\gamma_+ + \gamma_-)}) - i \frac{M\dot{\varepsilon}^*}{2\varepsilon^*} \zeta_2 \zeta_2^* + \frac{\sqrt{e}}{|\varepsilon|} \times \\ \left. \times (\beta^* \zeta_2^* e^{i\gamma_-} - i \alpha^* \zeta_2 e^{i\gamma_+} + i \alpha^* \beta^* e^{i(\gamma_+ + \gamma_-)})\right] = \delta(x_1 - x_2) \delta(y_1 - y_2). \quad (3.22)$$

Поэтому для произвольного состояния $|f\rangle$ с волновой функцией $\Psi_f(x, y)$ мы имеем следующее разложение:

$$|f\rangle = \pi^{-2} \int d^2\alpha d^2\beta |\alpha, \beta; t\rangle f(\alpha^*, \beta^*) \exp\left[-\frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2)\right]. \quad (3.23)$$

Здесь коэффициенты разложения $f(\alpha^*, \beta^*)$ определяются формулой

$$f(\alpha^*, \beta^*) = \iint_{-\infty}^{\infty} dx dy \Psi_f(x, y) \left(\frac{e}{\pi}\right)^{1/2} (e^*)^{-1} \times \\ \times \exp \left[-i \frac{M e^*}{2 e^*} \zeta \zeta^* + \frac{V e^-}{|e|} (\beta^* \zeta^* e^{i\gamma} - i \alpha^* \zeta e^{i\gamma} + i \alpha^* \beta^* e^{i(\gamma+\gamma^-)}) \right].$$

Для состояния $|n_1, n_2; t\rangle$ имеем следующее разложение по когерентным состояниям:

$$|n_1, n_2; t\rangle = \pi^{-2} \int d^2\alpha d^2\beta |\alpha, \beta; t\rangle \frac{(\alpha^*)^{n_1} (\beta^*)^{n_2}}{(n_1! n_2!)^{1/2}} \exp\left(-\frac{|\alpha|^2 + |\beta|^2}{2}\right). \quad (3.24)$$

Это разложение является обращением разложения (3.10).

Используя явный вид когерентных состояний $|\alpha, \beta; t\rangle$, можно найти явное выражение для функции Грина уравнения Шредингера, описывающего движение заряженной частицы в переменном электромагнитном поле. Соответствующая формула такова:

$$G(x_2, y_2, t_2; x_1, y_1, t_1) = \\ = \frac{e(2\pi i)^{-1}}{|\varepsilon_1 \varepsilon_2| \sin \gamma} \exp \left\{ i \left[\frac{M}{4e} \left(R_2^2 \frac{d^2 |\varepsilon|^2}{dt_2^2} - R_1^2 \frac{d^2 |\varepsilon|^2}{dt_1^2} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{2} (R_1 - R_2)^2 \operatorname{ctg} \gamma + [R_1 \times R_2]_z \right] \right\}. \quad (3.25)$$

Здесь $\gamma = \frac{e}{M} \int_{t_1}^{t_2} |\varepsilon(\tau)|^{-2} d\tau$; $R_i = \frac{V e^-}{|\varepsilon_i|} (x_i^2 + y_i^2)^{1/2}$, а фаза двумерного вектора R_i определяется из соотношения

$$\varphi_{R_i} = \operatorname{arctg}(y_i/x_i) - \gamma_-(t_i), \quad i = 1, 2.$$

Эта функция Грина является обобщением функции Грина для уравнения Шредингера, описывающего движение заряда в постоянном магнитном поле, полученной в работе Зондхаймера и Вильсона [90].

Функция Грина в координатном представлении (3.25) получена тем же способом, что и функция Грина осциллятора с переменными частотами. Знание когерентного состояния в явном виде (3.16) позволяет, вычисляя интеграл

$$\pi^{-2} \int d^2\alpha_1 d^2\alpha_2 \langle x_2, y_2; t_2 | \alpha_1, \alpha_2 \rangle \langle \alpha_1 \alpha_2 | x_1, y_1; t_1 \rangle,$$

получить искомое выражение. Таким образом, задача сводится к взятию известного гауссовского многомерного интеграла, часто используемого в дальнейшем (см. [88]):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int \exp\left(-\frac{1}{2} x a x + b x\right) dx = [(2\pi)^N \det a^{-1}]^{1/2} e^{b a^{-1} b/2}. \quad (3.26)$$

Здесь \mathcal{H} есть $\sum_{i,k=1}^N x_i a_{ik} x_k$; матрица a такова, что интеграл сходится.

Соотношение (3.10) показывает, что в когерентном состоянии $|\alpha, \beta; t\rangle$ распределение по квантовым числам n_1 и n_2 является распределением Пуассона

$$|\langle \bar{\alpha}, \beta; t | n_1, n_2; t \rangle|^2 = \frac{|\alpha|^{2n_1} |\beta|^{2n_2}}{n_1! n_2!} \exp(-|\bar{\alpha}|^2 - |\beta|^2).$$

Чтобы выяснить физический смысл когерентного состояния $|\alpha, \beta; t\rangle$, рассмотрим, как и для осциллятора, предельный случай при $t \rightarrow -\infty$. В таком пределе, если выбрать ϵ согласно формулам (3.8), это когерентное состояние совпадает с начальным когерентным состоянием $|\alpha, \beta; \text{in}\rangle$ для заряженной частицы в постоянном магнитном поле H_{in} . Состояние $|\alpha, \beta; t \rightarrow -\infty\rangle = |\alpha, \beta; \text{in}\rangle$ содержит зависимость от времени и подчиняется уравнению Шредингера $i \partial \Psi / \partial t = \mathcal{H} \Psi$. Начальное когерентное состояние, как легко показать, имеет вид

$$|\alpha, \beta; \text{in}\rangle = (M\omega_{\text{in}}/2\pi)^{1/2} \exp[-1/2 i\omega_{\text{in}}t - 1/4 M\omega_{\text{in}}\zeta\zeta^* - 1/2 |\alpha|^2 - 1/2 |\beta|^2 + (1/2 M\omega_{\text{in}})^{1/2} (\beta\zeta + i\alpha\zeta^* e^{-i\omega_{\text{in}}t}) - i\alpha\beta e^{-i\omega_{\text{in}}t}]. \quad (3.27)$$

С точностью до постоянного множителя интеграл движения $K(-\infty)$ совпадает с начальным гамильтонианом \mathcal{H}_{in} :

$$\mathcal{H}_{\text{in}} = \omega_{\text{in}} K(-\infty) = \omega_{\text{in}} (A_{\text{in}}^+ A_{\text{in}} + 1/2), \quad (3.28)$$

где оператор A_{in} дается формулой (3.9). Таким образом, собственные состояния $|n_1, n_2; \text{in}\rangle$ совпадают с хорошо известными собственными состояниями операторов энергии и проекции углового момента на магнитное поле L_z для заряженной частицы, движущейся в постоянном и однородном магнитном поле. В классическом случае эта частица движется в плоскости x, y по окружности с центром в точке (x_0, y_0) . Поскольку $|\alpha, \beta; \text{in}\rangle$ есть собственное состояние операторов A_{in} и B_{in} (см. уравнения (3.13)), ясно, что ожидаемые значения операторов координат относительного движения, а именно величин $x - x_0$ и $y - y_0$, совершают гармоническое колебание с амплитудой $|\alpha| (2/M\omega_{\text{in}})^{1/2}$. Координаты центра орбиты связаны с числом β . Эти координаты по осям абсцисс и ординат равны $(2/M\omega_{\text{in}})^{1/2} \text{Re } \beta$ и $(-2/M\omega_{\text{in}})^{1/2} \text{Im } \beta$ соответственно. Таким образом, когерентные состояния $|\alpha, \beta; \text{in}\rangle$ являются максимально классическими состояниями для заряженной частицы, движущейся в постоянном однородном магнитном поле H_{in} .

«Полукогерентные» состояния $|n_1, \beta; \text{in}\rangle$ являются наилучшим классическим приближением к стационарному состоянию с фиксированной энергией. В этих состояниях координаты центра орбиты волнового пакета x_0 и y_0 заданы с самой малой воз-

можной неопределенностью, отвечающей принципу неопределенности Гейзенберга. В то же время координаты относительного движения уже не отвечают в данном состоянии этому условию минимальности. Максимальная классичность в этом смысле квантового состояния имеет место только для состояния $|\alpha, \beta; \text{in}\rangle$, которое когерентно по отношению сразу к двум операторам: A_{in} и B_{in} . Точно так же волновые пакеты $|\alpha, \beta; t\rangle$ описывают в рамках строго квантового подхода максимально классические состояния заряженной частицы в аксиально-симметричном, зависящем произвольным образом от времени электромагнитном поле. Разумеется, в этом случае координаты x и y совершают более сложное движение, уже не являющееся гармоническим.

§ 4. Амплитуды переходов между уровнями Ландау

Предположим теперь, что электромагнитное поле постоянно в далеком прошлом и становится постоянным в далеком будущем. Предположим, таким образом, следующее:

$$\begin{aligned} H(t) &= H_{\text{in}}; & \varphi(t) &= 0; & t < 0; \\ H(t) &= H_{\text{f}}; & \varphi(t) &= 0; & t \rightarrow +\infty. \end{aligned} \quad (4.1)$$

При этих условиях, когда $t \rightarrow \pm\infty$, существуют начальные и конечные когерентные состояния, а также энергетические уровни Ландау. Можно поставить задачу о нахождении вероятностей переходов между этими состояниями или, что то же самое, о параметрическом возбуждении рассматриваемой системы с помощью переменного однородного магнитного поля. Амплитуда перехода, связывающая начальное $|\text{in}\rangle$ и конечное $|f\rangle$ состояния, дается матричным элементом (1.18). Выше уже было выбрано решение дополнительных классических уравнений (3.4) при больших отрицательных временах $t \rightarrow -\infty$ (см. соотношение (3.8)). Причина такого выбора состоит в том, чтобы удовлетворить условию $[K(-\infty), \mathcal{H}_{\text{in}}] = 0$. В таком случае в пределе $t \rightarrow -\infty$ собственные состояния операторов K и L_z совпали бы с решениями Ландау для постоянного магнитного поля H_{in} , а когерентные состояния $|\alpha, \beta; t \rightarrow -\infty\rangle$ совпали бы с начальными когерентными состояниями $|\alpha, \beta; \text{in}\rangle$. В пределе $t \rightarrow +\infty$ зависимость от времени $\Omega(t)$ приводит к более общему решению уравнения (3.4) и, вообще говоря, $[K(+\infty), \mathcal{H}_{\text{f}}] \neq 0$, а состояния $|n_1, n_2; +\infty\rangle$ и $|\alpha, \beta; +\infty\rangle$ не совпадают с соответствующими конечными состояниями, но, естественно, могут быть по ним разложены в ряды и интегралы соответственно.

Определим конечные операторы A_{f} и B_{f} следующим образом:

$$\begin{aligned} A_{\text{f}} &= (2M\omega_{\text{f}})^{-1/2} \exp[i(\omega_{\text{f}}t + \varphi_0)] [p_x + ip_y + 1/2 M\omega_{\text{f}}(y - ix)]; \\ B_{\text{f}} &= (2M\omega_{\text{f}})^{-1/2} e^{-i\varphi_0} [p_y + ip_x + 1/2 M\omega_{\text{f}}(x - iy)]. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Здесь фаза φ_0 определена равенством

$$\varphi_0 = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} [\omega(t) - \omega_f] dt.$$

Это определение конечных операторов A_f и B_f отличается от соответствующего определения начальных операторов A_{in} и B_{in} (см. (3.9)) на фазовый множитель $\exp(\pm i\varphi_0)$. Конечные состояния (относящиеся к постоянному полю H_f) даются следующими формулами. Конечные когерентные состояния $|\gamma, \delta; f\rangle$:

$$|\gamma, \delta; f\rangle = (M\omega_f/2\pi)^{1/2} \exp\{-1/2[i\omega_f t + 1/2 M\omega_f \zeta \zeta^* + |\gamma|^2 + |\delta|^2] + (1/2 M\omega_f)^{1/2} [\delta \zeta e^{i\varphi_0} + i\gamma \zeta^* \exp[-i(\omega_f t + \varphi_0)]] - i\gamma\delta e^{-i\omega_f t}\}; \quad (4.3)$$

конечные состояния $|m_1, m_2; f\rangle$ с фиксированными энергией и проекцией углового момента на магнитное поле:

$$|m_1, m_2; f\rangle = (-1)^p i^{m_1} \left[\frac{p! M\omega_f/2\pi}{(p + |m_1 - m_2|)} \right]^{1/2} \exp[i(m_2 - m_1)(\varphi + \varphi_0) - 1/4 M\omega_f \rho^2 - i(m_1 + 1/2)\omega_f t] (1/2 M\omega_f \rho^2)^{|m_1 - m_2|/2} L_p^{|m_1 - m_2|} (1/2 M\omega_f \rho^2), \quad (4.4)$$

где $p = 1/2(m_1 + m_2 - |m_1 - m_2|)$, а угол φ и величина ρ — полярные координаты двумерного вектора на плоскости x, y .

Интегралы движения A и B могут быть выражены через конечные операторы (4.2) следующим образом:

$$A(\infty) = \xi A_f + \eta B_f^\dagger; \quad B(\infty) = \eta A_f^\dagger + \xi B_f, \quad (4.5)$$

где комплексные величины ξ и η являются пределами при больших временах $t \rightarrow \infty$ двух функций $\xi(t)$ и $\eta(t)$:

$$\xi(t) = (2H_f)^{-1/2} \left(\frac{1}{2} H\varepsilon - i \frac{M}{e} \dot{\varepsilon} \right) \exp \left[i \left(\varphi_0 - \frac{1}{2} \int_0^t \omega(\tau) d\tau \right) \right]; \quad (4.6a)$$

$$\eta(t) = (2H_f)^{-1/2} \left(\frac{1}{2} iH\varepsilon - \frac{M}{e} \dot{\varepsilon} \right) \exp \left[-i \left(\varphi_0 - \frac{1}{2} \int_0^t \omega(\tau) d\tau \right) \right]. \quad (4.6b)$$

Коммутационные соотношения между операторами A и B (3.7) приводят к условию

$$|\xi|^2 - |\eta|^2 = 1, \quad (4.7)$$

которое, как легко проверить, удовлетворяется функциями (4.6). Общее решение уравнения (3.4) при больших временах t можно записать следующим образом:

$$\varepsilon_f = (2/H_f)^{1/2} \xi \exp(1/2 i\omega_f t) - i(2/H_f)^{1/2} \eta \exp(-1/2 i\omega_f t). \quad (4.8)$$

Поскольку решения волнового уравнения выражаются через функцию $\varepsilon(t)$, все амплитуды переходов в этой задаче полностью определены параметрами ξ и η . Можно также использовать компактный (θ) и некомпактный (δ) параметры:

$$\cos \theta = 1 - 2 |\eta/\xi|^2; \quad \text{ch } \delta = |\xi|^2 + |\eta|^2. \quad (4.9)$$

Рассчитаем сначала амплитуды переходов между когерентными состояниями $|\alpha, \beta; \text{in}\rangle$ и $|\gamma, \delta; \text{f}\rangle$. Вычисление этих амплитуд сводится к вычислению двукратного интеграла от экспоненты, показателем которой является квадратичная по переменным x и y форма. Ответ может быть представлен в следующем виде:

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta}^{\gamma\delta} &= \langle \gamma, \delta; \text{f} | \alpha, \beta; t \rightarrow \infty \rangle = \\ &= \xi^{-1} \exp \left[-\frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2) + \right. \\ &\quad \left. + \xi^{-1} (\alpha\beta\eta^* + \beta\delta^* + \alpha\gamma^* - \eta\gamma^*\delta^*) \right]. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Из определения когерентных состояний следует, что амплитуда перехода $T_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}$ задает производящую функцию для всех остальных амплитуд. Например, разлагая правую часть равенства (4.10) в ряд по степеням γ^* и δ^* и сравнивая это разложение с соотношением

$$T_{\alpha\beta}^{\gamma\delta} = \exp \left[-\frac{1}{2} (|\gamma|^2 + |\delta|^2) \right] \sum_{m_1, m_2=0}^{\infty} \frac{(\gamma^*)^{m_1} (\delta^*)^{m_2}}{(m_1! m_2!)^{1/2}} T_{\alpha\beta}^{m_1 m_2}, \quad (4.11)$$

мы найдем амплитуду перехода $T_{\alpha\beta}^{m_1 m_2}$ между начальными когерентными и конечными состояниями с заданной энергией и проекцией углового момента на направление магнитного поля:

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta}^{m_1 m_2} &= \left(\frac{m_2!}{m_1!} \right)^{1/2} \left(-\frac{\eta}{\xi} \right)^{m_2} \left(\frac{\alpha}{\xi} \right)^{m_1 - m_2} T_{\alpha\beta}^{00} L_{m_2}^{m_1 - m_2} \left(\frac{\alpha\beta}{\xi\eta} \right), \quad m_1 \geq m_2; \\ T_{\alpha\beta}^{m_1 m_2} &= \left(\frac{m_1!}{m_2!} \right)^{1/2} \left(-\frac{\eta}{\xi} \right)^{m_1} \left(\frac{\beta}{\xi} \right)^{m_2 - m_1} T_{\alpha\beta}^{00} L_{m_1}^{m_2 - m_1} \left(\frac{\alpha\beta}{\xi\eta} \right), \quad m_1 < m_2, \end{aligned} \quad (4.12)$$

где $L_p^s(x)$ — полиномы Лагерра. Вычисление данной амплитуды, по существу, является вычислением интеграла следующего вида:

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta}^{m_1 m_2} &\propto \iint_{-\infty}^{\infty} dx dy [\alpha(x^2 + y^2)]^{s/2} L_p^s[\alpha(x^2 + y^2)] \exp[\alpha(x^2 + y^2) + \\ &\quad + bx + cy]. \end{aligned}$$

Разлагая правую часть равенства (4.10) в ряд по степеням α и β , получим аналогичную амплитуду перехода между энергетическими состояниями и конечными когерентными состояниями:

$$\begin{aligned} T_{n_1 n_2}^{\gamma\delta} &= \left(\frac{n_2!}{n_1!} \right)^{1/2} \left(-\frac{\eta^*}{\xi} \right)^{n_2} \left(\frac{\gamma^*}{\xi} \right)^{n_1 - n_2} T_{00}^{\gamma\delta} L_{n_2}^{n_1 - n_2} \left(-\frac{\gamma^*\delta^*}{\xi\eta^*} \right), \quad n_1 \geq n_2; \\ T_{n_1 n_2}^{\gamma\delta} &= \left(\frac{n_1!}{n_2!} \right)^{1/2} \left(-\frac{\eta^*}{\xi} \right)^{n_1} \left(\frac{\delta^*}{\xi} \right)^{n_2 - n_1} T_{00}^{\gamma\delta} L_{n_1}^{n_2 - n_1} \left(-\frac{\gamma^*\delta^*}{\xi\eta^*} \right), \quad n_1 < n_2. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Вычисление этой амплитуды сводится к нахождению интеграла того же типа. В формулах (4.12), (4.13) величины $T_{\alpha\beta}^{0\gamma}$, $T_{0\gamma}^{\nu\delta}$ даются формулой (4.10), где полагаем сперва $\gamma = \delta = 0$, а затем $\alpha = \beta = 0$. Амплитуды переходов между «полукогерентными» состояниями могут быть вычислены тем же способом.

Представляет большой интерес вычисление амплитуд переходов между состояниями с фиксированными энергиями и проекциями углового момента на направление магнитного поля. Их можно получить, разлагая, например, амплитуду перехода $T_{\alpha\beta}^{m_1 m_2}$ в ряд по степеням переменных α и β . Для этого можно воспользоваться формулами дифференцирования полиномов Лагерра [88]. В результате получаем для разных случаев следующие выражения:

$$a) \quad n_2 \geq n_1, \quad m_i \geq n_i, \quad i = 1, 2;$$

$$T_{n_1 n_2}^{m_1 m_2} = \xi^{-1} (-1)^{m_1 - n_1} \left(\frac{n_1! m_2!}{n_2! m_1!} \right)^{1/2} \frac{(\xi^*)^{n_1} (\eta^*)^{m_1 - n_1}}{\xi^{m_2}} P_{n_1}^{(m_1 - n_1, n_2 - n_1)} \times \\ \times \left(1 - 2 \left| \frac{\eta^2}{\xi^2} \right| \right); \quad (4.14)$$

$$б) \quad m_2 \geq n_1, \quad m_i < n_i, \quad i = 1, 2;$$

$$T_{n_1 n_2}^{m_1 m_2} = \xi^{-1} \left(\frac{n_2! m_1!}{n_1! m_2!} \right)^{1/2} \frac{(\xi^*)^{m_1} (\eta^*)^{n_1 - m_1}}{\xi^{n_2}} P_{m_1}^{(n_1 - m_1, n_2 - n_1)} \left(1 - 2 \left| \frac{\eta^2}{\xi^2} \right| \right). \quad (4.15)$$

Здесь $P_n^{(\alpha, \beta)}$ — полиномы Якоби, а сохранение проекции момента количества движения на направление магнитного поля L_z приводит к условию $n_2 - n_1 = m_2 - m_1$, что учитывается в формулах (4.14) и (4.15). Эти формулы относятся к случаю положительной проекции момента $L_z \geq 0$. В случае отрицательной проекции момента можно получить те же самые формулы (4.14) и (4.15), но с заменой индексов $1 \rightleftharpoons 2$. Для вероятностей переходов соотношение (4.14) дает следующее выражение:

$$W_{n_1 n_2}^{m_1 m_2} = \frac{m_2! n_1!}{m_1! n_2!} R^{m_1 - n_1} (1 - R)^{n_2 - n_1 + 1} |P_{n_1}^{(m_1 - n_1, n_2 - n_1)}|^2, \quad (4.16)$$

где $R = |\eta/\xi|^2 < 1$ (через параметры θ и δ параметр R выражается так: $R = \sin^2 \frac{1}{2} \theta = \text{th}^2 \frac{1}{2} \delta$). Случай б) описывается той же формулой (4.16), если в ней сделать замены $n_i \rightleftharpoons m_i$.

Обсудим полученные формулы для вероятностей переходов (4.16). Мы получили величины $W_{n_1 n_2}^{m_1 m_2}$, выраженные через вероятность перехода вакуум — вакуум $|0, 0; \text{in}\rangle \rightarrow |0, 0; \text{f}\rangle$: $W_{00}^{00} = 1 - R$. Полученные соотношения обладают определенными свойствами симметрии: $W_{n_1 n_2}^{m_1 m_2} = W_{n_2 n_1}^{m_2 m_1}$ (что означает независимость вероятностей перехода от знака L_z), а также $W_{n_1 n_2}^{m_1 m_2} = W_{n_1 n_2}^{n_1 n_2}$. Этот факт отражает независимость параметра R от изменения знака времени, поскольку величина R может трактоваться как коэффициент отражения от одномерного эф-

эффективного потенциала, определяемого функцией $\Omega(t)$. (Такая трактовка при рассмотрении одномерного осциллятора использовалась в работах [72, 91, 92].) Причем несущественно, что поле $H(t)$ и потенциал $\varphi(t)$ не удовлетворяют равенствам $H(t) = H(-t)$ и $\varphi(t) = \varphi(-t)$. Если принять такую трактовку, то, как известно, коэффициент отражения R для волны, падающей на барьер справа, будет равен коэффициенту при падении на барьер слева, даже если барьер несимметричен. Действительно, уравнение $\ddot{\epsilon} + \Omega^2(t)\epsilon = 0$ аналогично одномерному уравнению Шредингера, если заменить время t координатой x и функцию $\Omega^2(t)$ функцией $k^2(x)$. Тогда, принимая во внимание уравнения (3.8) и (4.8), найдем, что величина $i\eta/\xi^*$ определяет амплитуду отраженной волны. Соответствующий эффективный потенциал $U(x)$ определяется функцией $\Omega(t)$:

$$\Omega^2(x) = \Omega_{\text{in}}^2 + 2M [U(-\infty) - U(x)].$$

Здесь массу рассеиваемой частицы мы также взяли равной M , чтобы избежать новых обозначений. Поскольку величина $\Omega^2(t)$ может быть как положительной, так и отрицательной, то для энергии рассеиваемой частицы имеем

$$E = \Omega_{\text{in}}^2/2M + U(-\infty) \geq U(x),$$

что необходимо принимать во внимание при расчете коэффициента отражения R . Эта простая аналогия позволяет нам использовать для расчета R (или $W_{00}^{00} = 1 - R$) методы, хорошо разработанные в квантовой механике.

Можно рассмотреть некоторые примеры и предельные случаи полученных точных формул. В случае $\Omega^2 > 0$ можно взять точно решаемый потенциал Экарта, для которого коэффициент отражения R имеет вид

$$R = \{ \text{ch} [\pi l (\omega_{\text{in}} - \omega_{\text{r}})] + \cos (\pi^2 - 8M\pi^2 l^2 B)^{1/2} \} \times \\ \times \{ \text{ch} [\pi l (\omega_{\text{in}} + \omega_{\text{r}})] + \cos (\pi^2 - 8M\pi^2 l^2 B)^{1/2} \}^{-1}.$$

Здесь величины B и l являются параметрами, определяющими потенциал. В случае барьера $U(x) = U_0/\text{ch}^2 \alpha x$ и $\Omega^2 < 0$ мы имеем

$$R = \cos^2 \left[\frac{1}{2} \pi (1 - 8MU_0/\alpha^2)^{1/2} \right] \{ \text{sh}^2 (\pi \omega_{\text{in}}/2\alpha) + \\ + \cos^2 \left[\frac{1}{2} \pi (1 - 8MU_0/\alpha^2)^{1/2} \right] \}^{-1}; \\ 8MU_0 < \alpha^2.$$

Адиабатическое приближение ($W_{n_1 n_2}^{m_1 m_2} \approx 1$) справедливо, если $R \ll 1$ и $n_1 n_2 R \ll 1$. Можно прийти к этому заключению, если разложить вероятность $W_{n_1 n_2}^{m_1 m_2}$ в ряд по параметру R (в последующих формулах $m_i \geq n_i$, $i = 1, 2$, и $L_z > 0$):

$$W_{n_1 n_2}^{m_1 m_2} = 1 - (2n_1 n_2 + n_1 + n_2 + 1) R + O(R). \quad (4.17)$$

Можно записать также при $m_i \rightarrow \infty$ следующее выражение для этой вероятности:

$$W_{n_1 n_2}^{m_1 m_2} = \frac{m_1! m_2!}{n_1! n_2!} \frac{R^{m_1 - n_1}}{[(m_1 - n_1)!]^2} \left[1 - \left(\frac{2n_1 n_2}{1 + m_1 - n_1} + n_1 + n_2 + 1 \right) R + \dots \right]. \quad (4.18)$$

Для высоковозбужденных состояний ($n_1 n_2 R \ll 1$) асимптотическое выражение (4.17) несправедливо. Для $n_1, n_2 \rightarrow \infty$ (при фиксированном L_z) можно использовать асимптотику полиномов Якоби [88] и получить

$$W_{n_1 n_2}^{m_1 m_2} \approx \frac{n_1! m_2!^{1/2} \theta \operatorname{ctg} \theta}{n_1! n_2! N^{2(m_1 - n_1)}} |J_{m_1 - n_1}(N\theta)|^2, \quad (4.19)$$

где $N = 1/2 (m_2 + n_1 + 1)$; $\sin^2(\theta/2) = R$; $J_{m_1 - n_1}$ — функция Бесселя. В асимптотических выражениях (4.17)–(4.19) угловой момент фиксирован и мал по сравнению с n_2 и m_2 . Для больших и положительных L_z имеем

$$W_{n_1 n_2}^{m_1 m_2} = \binom{n_2}{n_1} \binom{m_2}{m_1} R^{m_1 + n_1} (1 - R)^{L_z + 1} \left[1 - \frac{2n_1 m_2}{1 + L_z} + O\left(\frac{1}{R^2 L_z^2}\right) \right]. \quad (4.20)$$

Эта формула неверна, если $R \rightarrow 0$. Из теории полиномов Якоби, в частности касающейся нулей этих полиномов, следует, что число нулей в вероятности перехода $W_{n_1 n_2}^{m_1 m_2}(R)$ в интервале $0 \leq R < 1$ равно наименьшему из чисел n_1, n_2 и m_1, m_2 .

Все описанные результаты можно легко обобщить на случай заряженной частицы с переменной массой. Волновое уравнение для частицы с зависящей от времени массой может быть сведено к уравнению для частицы с постоянной массой следующей заменой переменных:

$$t' = \int \frac{M_0}{M(\tau)} d\tau. \quad (4.21)$$

Здесь t — время, t' — новая переменная.

Затем рассматривается заряженная частица массы M_0 , заряда e , движущаяся в электромагнитном поле с потенциалами

$$A' = A(t(t')); \quad \varphi' = M_0^{-1}(t(t')) \varphi(t(t')).$$

Таким образом, все предыдущие результаты справедливы и относятся к этим новым потенциалам. Случай частицы переменной массы $M(t)$, движущейся в постоянном магнитном поле H и при $\varphi = 0$, очень прост. Легко проверить, что решение волнового уравнения в этом случае имеет вид

$$|n_1, n_2; t\rangle = \exp[i\alpha_{n_1}(t)] |n_1, n_2\rangle, \quad (4.22)$$

где $\alpha_{n_1} = -\left(n_1 + \frac{1}{2}\right) \int \frac{eH}{M(\tau)} d\tau$ и $|n_1, n_2\rangle$ — собственные функции гамильтониана \mathcal{H} и оператора L_z для частицы с постоянной массой M_0 в постоянном магнитном поле H . Эффект переменной массы сводится в этом случае к фазовому множителю.

§ 5. Когерентные состояния и возбуждение электрическим полем заряженной частицы в постоянном магнитном поле

Методом, развитым в предыдущих параграфах, можно решить практически интересную задачу о переходах между уровнями энергии Ландау под влиянием не переменного магнитного поля, а переменного электрического поля.

Целью данного параграфа является нахождение всех независимых интегралов движения для заряда, движущегося в постоянном во времени и однородном в пространстве магнитном поле и перпендикулярном ему переменном однородном электрическом поле, введение когерентных состояний для этой системы и вычисление в замкнутом виде функции Грина. Для случая переменного электрического поля, равного нулю в далеком прошлом и далеком будущем, в замкнутом виде вычисляются амплитуды переходов между когерентными состояниями, а также амплитуды переходов между уровнями Ландау, выражающиеся через полиномы Лагерра.

Рассмотрим квантовую заряженную частицу, движущуюся в постоянном магнитном поле H , направленном по оси z , и электрическом поле с компонентами $E_x = E_1(t)$, $E_y = E_2(t)$, $E_z = 0$, причем будем для простоты считать массу и заряд частицы равными единице. Движение такой частицы в плоскости x, y будет описываться волновой функцией $\Psi(x, y, t)$, удовлетворяющей уравнению Шредингера ($\hbar = c = 1$)

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \right) + \frac{\omega^2}{8} (x^2 + y^2) \Psi + \frac{i\omega}{2} \left(x \frac{\partial \Psi}{\partial y} - y \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) - (E_1 x + E_2 y) \Psi, \quad (5.1)$$

где калибровка выбрана так, что $A = [H \times r / 2]$, а частота $\omega = H$. Введем новые переменные, что эквивалентно переходу к движущейся системе координат:

$$\zeta = -\frac{x + iy}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{i\omega t}{2}\right); \quad \zeta^* = \frac{iy - x}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right). \quad (5.2)$$

Уравнение (5.1) перепишется в виде

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \zeta \partial \zeta^*} + \frac{\omega^2}{4} |\zeta|^2 \Psi + (F\zeta^* + F^*\zeta) \Psi, \quad (5.3)$$

где величина $F = 2^{-1/2} (E_1 + iE_2) \exp(i\omega t/2)$. Легко непосредственной проверкой показать, что линейные неэрмитовы операторы

$$\begin{aligned} A &= \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\omega t/2} \left[\sqrt{\frac{\omega}{2}} (\zeta + \zeta_0) + \sqrt{\frac{2}{\omega}} \left(\frac{\partial}{\partial \zeta^*} + i\zeta_0 \right) \right]; \\ B &= -\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega t/2} \left[\sqrt{\frac{\omega}{2}} (\zeta^* + \zeta_0^*) + \sqrt{\frac{2}{\omega}} \left(\frac{\partial}{\partial \zeta} + i\zeta_0^* \right) \right] \end{aligned} \quad (5.4)$$

являются интегралами движения (коммутируют с оператором $i\partial/\partial t - \mathcal{H}$) и удовлетворяют коммутационным соотношениям бозонных операторов рождения и уничтожения $[A, A^\dagger] = [B, B^\dagger] = 1$; $[A, B] = [A, B^\dagger] = 0$. Комплексная величина ζ_0 удовлетворяет классическому уравнению движения

$$\ddot{\zeta}_0 + \omega^2 \zeta_0/4 = F. \quad (5.5)$$

В случае равно нулю электрического поля ($E = 0$) операторы (5.4) переходят в операторы, построенные в [69, 72].

Проверкой нетрудно убедиться, что унитарный оператор

$$D = \exp \left[i \int_0^t \left(\frac{1}{4} \omega^2 |\zeta_0|^2 - |\dot{\zeta}_0|^2 \right) d\tau - i (\zeta \zeta_0^* \zeta^* \zeta_0) \right] \exp \left(\zeta_0 \frac{\partial}{\partial \zeta} + \zeta_0^* \frac{\partial}{\partial \zeta^*} \right) \quad (5.6)$$

связывает решение Ψ_0 задачи для заряда, движущегося в постоянном магнитном поле без электрического поля, с решением уравнений (5.1) и (5.3), так что $\Psi = D \Psi_0$. Поэтому легко перенести все результаты, полученные для заряда в постоянном магнитном поле, на рассматриваемый случай. Построим когерентное состояние, являющееся решением уравнений (5.1), (5.3):

$$\begin{aligned} |\alpha, \beta\rangle &= \\ &= \sqrt{\frac{\omega}{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{\omega}{2} (|\zeta|^2 + |\zeta_0|^2) - \left(i\dot{\zeta}_0^* + \frac{\omega}{2} \zeta_0^* \right) \zeta - \left(i\dot{\zeta}_0 + \frac{\omega}{2} \zeta_0 \right) \zeta^* - \right. \\ &\quad \left. - \frac{i\omega t}{2} - \frac{|\alpha|^2}{2} - \frac{|\beta|^2}{2} - i\alpha\beta e^{-i\omega t} [\alpha (\zeta^* + \zeta_0^*) - i\beta (\zeta + \zeta_0)] + \right. \\ &\quad \left. + i \int_0^t \left(\frac{\omega^2}{4} |\zeta_0|^2 - |\dot{\zeta}_0|^2 \right) d\tau \right\}, \end{aligned} \quad (5.7)$$

где α, β — постоянные комплексные числа, причем выполняются соотношения $A |\alpha, \beta\rangle = \alpha |\alpha, \beta\rangle$; $B |\alpha, \beta\rangle = \beta |\alpha, \beta\rangle$. Когерентные состояния (5.7) образуют полную систему функций в том смысле, что

$$\pi^{-2} \int d^2\alpha d^2\beta \langle x, y | \alpha, \beta \rangle \langle \alpha, \beta | x', y' \rangle = \delta(x - x') \delta(y - y'). \quad (5.8)$$

Волновая функция (5.7), как и в случае магнитного поля, описывает пакет, движущийся по классической траектории. По-

сколько когерентные состояния являются производящей функцией для решений в представлении, в котором диагональны квадратичные интегралы движения $A^\dagger A$ и $B^\dagger B$, легко получить явный вид этих решений:

$$\begin{aligned}
 |n_1, n_2\rangle = & \sqrt{\frac{\omega}{2\pi}} \exp\left[-\frac{\omega^2}{2} (|\zeta|^2 + |\zeta_0|^2) - \left(i\dot{\zeta}_0^* + \frac{\omega}{2}\zeta_0^*\right)\zeta - \right. \\
 & \left. - \left(i\dot{\zeta}_0 + \frac{\omega}{2}\zeta_0\right)\zeta^* - i(n_1 + n_2)\frac{\omega t}{2} - \frac{i\omega t}{2} + i\int_0^t \left(\frac{\omega^2}{4}|\zeta_0|^2 - |\dot{\zeta}_0|^2\right) d\tau\right] \times \\
 & \times \left\{ \frac{p!}{[(p + |n_1 - n_2|)/2]!} \right\}^{1/2} (-1)^{p+n_1+n_2} i^{n_1} (|\zeta + \zeta_0|^2 \omega)^{|n_1 - n_2|/2} \times \\
 & \times \left| \frac{\zeta + \zeta_0}{\zeta_0^* + \zeta^*} \right|^{(n_1 - n_2)/2} J_p^{|n_1 - n_2|}(\omega|\zeta + \zeta_0|^2), \quad (5.9)
 \end{aligned}$$

где $p = 1/2(n_1 + n_2 - |n_1 - n_2|)$; $L_p^m(x)$ — полином Лагерра, а n_1, n_2 являются положительными целыми числами. Функции (5.9) удовлетворяют условиям $A^\dagger A |n_1, n_2\rangle = n_1 |n_1, n_2\rangle$; $B^\dagger B |n_1, n_2\rangle = n_2 |n_1, n_2\rangle$ и условиям ортогональности $\langle m_1, m_2 | n_1, n_2\rangle = \delta_{n_1 m_1} \delta_{n_2 m_2}$ и являются обобщением на рассматриваемый случай решений для постоянного магнитного поля, отвечающих состояниям с заданными энергией и моментом количества движения.

Поскольку функции (5.7) образуют полную систему, функция Грина уравнения (5.1) может быть легко вычислена из соотношения $G(2, 1) = \pi^{-2} \int d^2\alpha d^2\beta | \alpha, \beta; 2\rangle \langle \alpha, \beta; 1 |$. Эту функцию также легко получить из функции Грина для заряда в постоянном магнитном поле [90], используя унитарный оператор (5.6).

Введем обозначения

$$x_2 = -2^{-1/2} [(\zeta_2 + \zeta_0(t_2)) e^{-i\omega t_2/2} + (\zeta_2^* + \zeta_0^*(t_2)) e^{i\omega t_2/2}]$$

и

$$y_2 = i 2^{-1/2} [(\zeta_2 + \zeta_0(t_2)) e^{-i\omega t_2/2} - (\zeta_2^* + \zeta_0^*(t_2)) e^{i\omega t_2/2}]$$

и аналогично x_1, y_1 . Величины ζ_2 и ζ_2^* определяются из соотношения (5.2).

Функция Грина для уравнения (5.1) имеет, как легко показать, следующий вид:

$$\begin{aligned}
 G(x_2, y_2, t_2; x_1, y_1, t_1) = & \\
 = & \omega \left(4\pi i \sin \frac{\omega(t_2 - t_1)}{2}\right)^{-1} \exp\left\{i\int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\omega^2}{4}|\zeta_0|^2 - |\dot{\zeta}_0|^2\right) d\tau + \right. \\
 & \left. + i(\dot{\zeta}_0(t_1)\zeta_1^* + \dot{\zeta}_0^*(t_1)\zeta_1 - \dot{\zeta}_0^*(t_2)\zeta_2 - \dot{\zeta}_0(t_2)\zeta_2^*) + \right. \\
 & \left. + \frac{i\omega}{4} \operatorname{ctg} \frac{\omega(t_2 - t_1)}{2} [(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + \omega(x_1 y_2 - x_2 y_1)]\right\}. \quad (5.10)
 \end{aligned}$$

Множитель, отвечающий свободному движению вдоль магнитного поля, — обычного вида. Функция Грина (5.10) имеет, в соответствии с [86], вид $\exp(i, S_{cl})F(t_2, t_1)$. Следует отметить, что когерентное состояние $|\alpha, \beta\rangle$ может быть получено действием унитарного оператора вейлевского сдвига $D(\alpha, \beta) = \exp(\alpha A^\dagger - \alpha^* A + \beta B^\dagger - \beta^* B)$ на вакуум: $|\alpha, \beta\rangle = D(\alpha, \beta)|0, 0\rangle$.

Рассмотрим теперь частный случай движения заряда, когда электрическое поле постоянно, равно E и направлено по оси y . Для рассмотрения этого случая достаточно в предыдущих формулах положить $\zeta_0 = F/\omega^2$. Отметим, что в таком случае существует движущаяся со скоростью $v = E/H$ вдоль оси x система координат, в которой электрическое поле отсутствует, а величина магнитного поля равна величине магнитного поля в неподвижной системе координат. Такое соотношение полей согласуется с преобразованиями Лоренца, в которых учтены только линейные члены по скорости. Однако решения уравнений (5.1), (5.3) с взаимно перпендикулярными полями имеют вид (5.7), (5.9) и в том случае, когда $E/H > 1$, т. е. когда скорость движущейся системы координат больше скорости света. Естественно, что никакого внутреннего противоречия здесь нет, поскольку уравнение (5.1) является нерелятивистским.

Соответствующие классические нерелятивистские уравнения движения для заряда во взаимно перпендикулярных постоянных электрическом и магнитном полях также имеют решения, описывающие движения со скоростью, большей скорости света [70]. Переходу в движущуюся систему координат соответствует оператор (5.6). Этот оператор задает нагруженное бесконечномерное неприводимое унитарное представление группы Галилея. Оператор (5.6) можно рассматривать как оператор сдвига Вейля, рождающий из вакуума когерентное состояние, отвечающее постоянному магнитному полю. Параметры этого когерентного состояния α, β меняются со временем: $\alpha = 2^{-1/2} E e^{it}$, $\beta = 2^{-1/2} E (1 + t)$ (частота ω положена равной единице).

Следует отметить, что связь волновых функций для различных систем координат для заряда в электромагнитных полях (оператор (5.6)) не такая, как для движения частицы в заданном потенциальном поле (см. [53]). Вычисление средних координат и скоростей по состояниям $|n_1, n_2\rangle$ для постоянного электрического поля дает $\bar{x} = vt$, $\bar{y} = 0$, $\bar{v}_x = v$, $\bar{v}_y = 0$. Для электрического поля, равного нулю, получается обычный ответ для средних по стационарным состояниям от операторов координат и скоростей. Среднее от гамильтониана в этом случае по состоянию $|n_1, n_2\rangle$ также имеет естественный вид: $\bar{\mathcal{H}} = 1/2 v^2 + (n_1 + 1/2)\omega$. Легко подсчитать среднее от координат и импульсов по когерентным состояниям. Эти средние движутся по классическим траекториям в фазовом пространстве.

Интегралы движения A, B имеют следующий физический

смысл: в движущейся системе координат оператор B (величина β) задает центр окружности, по которой происходит классическое движение, а оператор A (величина α) задает начальные координаты движения вокруг этого центра. Квадратичные интегралы $A^\dagger A$ и $B^\dagger B - A^\dagger A$ задают энергию и угловой момент в движущейся системе координат. Смысл этих операторов для случая переменного электрического поля аналогичен, с той разницей, что движение системы координат происходит не с постоянной скоростью.

Пусть до нулевого момента времени существовало только постоянное магнитное поле. В нулевой момент включается переменное электрическое поле, и при очень больших временах это поле выключается. В начальный момент существуют когерентные состояния $|\alpha, \beta; \text{in}\rangle$. При очень больших временах существуют когерентные состояния, являющиеся собственными для операторов A, B , в которых ζ_0 положено равным нулю. Легко сосчитать амплитуду перехода между этими когерентными состояниями:

$$\begin{aligned} \langle \mu, \nu; f | \alpha, \beta; \text{in} \rangle &= \langle 0, 0; f | 0, 0; \text{in} \rangle \times \\ &\times \exp \left[-\frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\mu|^2 + |\nu|^2) + \alpha\mu^* + \beta\nu^* + \right. \\ &\quad \left. + \rho^*\alpha - \sigma\beta - \rho\mu^* + \sigma^*\nu^* \right]; \\ \langle 0, 0; f | 0, 0; \text{in} \rangle &= \exp \left[-\frac{1}{2} (|\sigma|^2 + |\rho|^2) + \frac{i}{2} \int_0^t (F\zeta_0^* + F^*\zeta_0) d\tau \right]; \end{aligned} \quad (5.11)$$

$$\begin{aligned} \zeta_0(t) &= \frac{2}{\omega} \int_0^t F(\tau) \sin \frac{\omega(t-\tau)}{2} d\tau; \quad \sigma = -\frac{i}{\sqrt{\omega}} \int_0^\infty F(\tau) e^{-i\omega\tau/2} d\tau; \\ \rho &= -\frac{1}{\sqrt{\omega}} \int_0^\infty F(\tau) e^{i\omega\tau/2} d\tau. \end{aligned}$$

Здесь комплексные константы ρ, σ являются величинами, задающими асимптотику функции $\zeta_0(t)$ при больших временах ($t \rightarrow \infty$): $\zeta_0 = \omega^{-1/2} [\sigma \exp(i\omega t/2) - i\rho \exp(-i\omega t/2)]$. Поскольку задано когерентное состояние

$$|\alpha, \beta; \text{in}\rangle = \exp \left[-\frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2) \right] \sum_{n_1, n_2=0}^{\infty} \frac{\alpha^{n_1} \beta^{n_2}}{(n_1! n_2!)^{1/2}} |n_1, n_2; \text{in}\rangle$$

и когерентное состояние

$$|\mu, \nu; f\rangle = \exp \left[-\frac{1}{2} (|\mu|^2 + |\nu|^2) \right] \sum_{m_1, m_2=0}^{\infty} \frac{\mu^{m_1} \nu^{m_2}}{m_1! m_2!} |m_1, m_2; f\rangle,$$

легко сосчитать амплитуды перехода между состояниями с задан-

НЫМИ энергией и моментом:

$$\langle m_1, m_2; f | n_1, n_2; \text{in} \rangle = \langle 0, 0; f | 0, 0; \text{in} \rangle (m_1! m_2! n_1! n_2!)^{1/2} \times \\ \times (q_1! q_2!)^{-1} (-\rho/\rho^*)^{m_1-n_1} |\rho|^{m_1-n_1/2} (\sigma^*/\sigma)^{m_2-n_2} |\sigma|^{m_2-n_2/2} \times \\ \times L_{p_1}^{q_1-p_1} (|\rho|^2) L_{p_2}^{q_2-p_2} (|\sigma|^2), \quad (5.12)$$

где

$$p_1 = 1/2 (n_1 + m_1 - |n_1 - m_1|); \quad p_2 = 1/2 (n_2 + m_2 - |n_2 - m_2|); \\ q_1 = 1/2 (n_1 + m_1 + |n_1 - m_1|); \quad q_2 = 1/2 (n_2 + m_2 + |n_2 - m_2|).$$

§ 6. Когерентные состояния и функция Грина осциллятора с переменной частотой в произвольно направленных, переменных, однородных электрическом и магнитном полях соленоида

В настоящем параграфе будет рассмотрена более общая система, чем в предыдущем, причем рассмотрение будет вестись по той же схеме.

Цель настоящего параграфа состоит в нахождении всех независимых линейных интегралов движения для нерелятивистской заряженной частицы, движущейся в произвольно зависящих от времени электрическом и магнитном полях, удовлетворяющих условию квазистационарности, а также в получении точного решения уравнения Шредингера этой задачи, являющегося обобщением на случай переменных полей решения Ландау для заряда в постоянном однородном магнитном поле. В этом параграфе вводятся когерентные состояния для рассматриваемой задачи и вычисляется с их помощью функция Грина в явном виде. Для случая электрического и магнитного полей таких, что в далеком прошлом и далеком будущем магнитное поле постоянно, а электрическое поле равно нулю, вычисляются точно (не по теории возмущений) амплитуды переходов между уровнями с заданными энергией и моментом, которые выражаются через полиномы Эрмита от четырех переменных. Вычисляются амплитуды переходов между когерентными состояниями. Решается полностью задача о заряженном осцилляторе, находящемся в переменных однородных электрическом и магнитном полях.

Для простоты сначала рассмотрим не осциллятор, а свободный заряд в электромагнитном поле.

Уравнение Шредингера для задачи о заряженной частице, движущейся в переменном электромагнитном поле, имеет вид такой же, как и (5.1):

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} \right) + \frac{\omega^2}{8} (x^2 + y^2) \Psi + \\ + \frac{i\omega}{2} \left(x \frac{\partial \Psi}{\partial y} - y \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) - (E_1 x + E_2 y) \Psi. \quad (6.1)$$

Выбрана система единиц, в которой $\hbar = c = 1$, а заряд и масса для простоты положены равными единице. Внешнее электромагнитное поле задается потенциалами

$$A = 1/2 [H \times r]; \quad \varphi = -E(t)r,$$

где $H(t) = (0, 0, \omega(t))$; $E(t) = (E_1(t), E_2(t), 0)$. Для простоты рассматривается случай $EH = 0$.

Для постоянных потенциалов уравнение (6.1) описывает движение частицы в скрещенных постоянных полях. Задача о частице со спином, движущейся в рассматриваемых полях, сводится к решению уравнения (6.1) заменой компонент волновой функции

$$\Psi_{s_z} = \Psi_{s_z}^{s_0} \exp \left[i\mu_0 s_z \int_0^t \omega(\tau) d\tau \right],$$

отвечающих состояниям с заданными проекциями спина s_z на магнитное поле. В уравнении (6.1) учтена часть волновой функции, зависящая от переменных x, y , поскольку движение вдоль магнитного поля является свободным. Выбранные потенциалы полей удовлетворяют уравнениям Максвелла в приближении квазистационарных полей.

Введем переменные $\zeta(t)$, отвечающие переходу в движущуюся систему координат [69]:

$$\zeta(t) = -2^{-1/2} (x + iy) \exp \left[\frac{i}{2} \int_0^t \omega(\tau) d\tau \right]. \quad (6.2)$$

Уравнение (6.1) принимает в этих переменных вид (5.3), где введена комплексная сила

$$F = 2^{-1/2} (E_1 + iE_2) \exp \left[\frac{i}{2} \int_0^t \omega(\tau) d\tau \right].$$

Как отмечалось, можно найти интегралы движения способом, использованным выше. Непосредственной проверкой легко убедиться, что операторы

$$\begin{aligned} A &= 2^{-1/2} (\dot{\varepsilon}\zeta + i\varepsilon \partial/\partial \zeta^* + \varepsilon \dot{\zeta}_0 - \varepsilon \dot{\zeta}_0); \\ B &= 2^{-1/2} (i\varepsilon \zeta^* - \varepsilon \partial/\partial \zeta + i\varepsilon \dot{\zeta}_0^* - i\varepsilon \dot{\zeta}_0^*) \end{aligned} \quad (6.3)$$

являются интегралами движения (коммутируют с оператором $\mathcal{H} - i\partial/\partial t$). Здесь зависящие от времени функции $\varepsilon(t)$, $\zeta_0(t)$ — решения уравнений

$$\ddot{\varepsilon} + \omega^2 \varepsilon/4 = 0; \quad \ddot{\zeta}_0 + \omega^2 \zeta_0/4 = F, \quad (6.4)$$

причем $\varepsilon = |\varepsilon| \exp \left(i \int_0^t |\varepsilon|^{-2} d\tau \right)$.

Операторы A, B удовлетворяют коммутационным соотношениям бозевских операторов рождения и уничтожения:

$$[A, A^\dagger] = [B, B^\dagger] = 1; \quad [A, B] = [A, B^\dagger] = 0.$$

Эти операторы в случае равного нулю электрического поля ($\xi_0 = 0$) переходят в интегралы движения, построенные выше. Если положить при этом функцию ε равной

$$\varepsilon_c = 2^{1/2} \omega_c^{-1/2} \exp(i\omega_c t/2), \quad (6.5)$$

где ω_c — постоянная частота, инварианты (6.3) переходят в операторы, построенные выше для случая заряда, движущегося в постоянном однородном магнитном поле.

Физический смысл интегралов движения (6.3), являющихся линейными функциями операторов координат и импульсов, заключается в том, что их действительные и мнимые части задают начальную точку на классической траектории. По теореме Эренфеста для квадратичных систем средние от операторов координат и импульсов движутся по классическим траекториям. Физический смысл операторов (6.3) A и B можно пояснить еще и тем, что их комплексные собственные числа задают как раз начальные средние значения координат и импульсов. Любые другие интегралы движения, в частности квадратичные, могут быть построены из линейных инвариантов (6.3).

Сформулированное утверждение переносится на другие квантовые системы (см. ниже, §§ 1, 3 гл. III), однако для неквадратичных гамильтонианов явно построить линейные интегралы движения, собственные комплексные числа которых задают начальные средние от операторов координат и импульсов, сложнее. Фактически это — задача о построении когерентных состояний и о вычислении фейнмановского интеграла по путям для неквадратичных гамильтонианов. Сведем, как и в § 5, задачу к случаю $E = 0$ и построим когерентные состояния.

Рассмотрим вопрос о связи решений уравнений (6.1) с решениями уравнения Шредингера, когда электрическое поле отсутствует. Легко непосредственно проверить, что унитарный оператор вида (5.6)

$$D = \exp[-i(\zeta \dot{\xi}_0^* + \zeta^* \dot{\xi}_0)] \exp \left[\zeta_0 \frac{\partial}{\partial \xi} + \zeta_0^* \frac{\partial}{\partial \xi^*} + i \int_0^t \left(\frac{\omega^2}{4} |\zeta_0|^2 - |\dot{\xi}_0|^2 \right) \tau \right] \quad (6.6)$$

задает одно-однозначное соответствие решений Ψ уравнений (6.1), (6.3) и решений Ψ_0 для заряда в переменном магнитном поле при равном нулю электрическом поле, т. е. $\Psi = D\Psi_0$. Поэтому легко перенести все результаты, полученные для заряда в магнитном поле, на рассматриваемый общий случай.

Построим когерентные состояния $|\alpha, \beta; t\rangle$, явное выражение для которых имеет вид (ср. с (5.7))

$$\begin{aligned}
 |\alpha, \beta; t\rangle = & e^{-1} \pi^{-1/2} \exp \left\{ i \frac{\varepsilon}{\varepsilon} (|\zeta|^2 + |\zeta_0|^2) - \right. \\
 & - \frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2) - \left(i \zeta_0^* - i \frac{\varepsilon}{\varepsilon} \zeta_0^* \right) \zeta - \left(i \zeta_0 - i \frac{\varepsilon}{\varepsilon} \zeta_0 \right) \zeta^* - \\
 & - i \varepsilon^{-1} 2^{1/2} [\alpha (\zeta^* + \zeta_0^*) - i \beta (\zeta + \zeta_0)] - \\
 & \left. - i \alpha \beta \frac{\varepsilon^*}{\varepsilon} + i \int_0^t \left(\frac{\omega^2}{4} |\zeta_0|^2 - |\zeta_0|^2 \right) d\tau \right\}. \quad (6.7)
 \end{aligned}$$

Легко убедиться, что нормированная волновая функция $|\alpha, \beta; t\rangle$ является решением уравнения (6.1) и удовлетворяет условиям $A|\alpha, \beta; t\rangle = \alpha|\alpha, \beta; t\rangle$; $B|\alpha, \beta; t\rangle = \beta|\alpha, \beta; t\rangle$. Величины α, β — постоянные комплексные числа.

Легко вычислить явный вид функций $|n_1, n_2; t\rangle$:

$$\begin{aligned}
 |n_1, n_2; t\rangle = & |0, 0; t\rangle \left[\frac{p!}{(p + |n_1 - n_2|)!} \right]^{1/2} i^{n_1} (-1)^{(n_1 + n_2 + |n_1 - n_2|)/2} \times \\
 & \times \left(\frac{\zeta_0 + \zeta}{\zeta_0^* + \zeta^*} \right)^{(n_2 - n_1)/2} \left(\frac{\varepsilon^*}{\varepsilon} \right)^{(n_1 + n_2)/2} \left[\frac{V \sqrt{2} (\zeta_0 + \zeta)}{\varepsilon} \right]^{|n_1 - n_2|} \times \\
 & \times L_p^{|n_1 - n_2|} \left(2 \left| \frac{\zeta_0 + \zeta}{\varepsilon} \right|^2 \right), \quad (6.8)
 \end{aligned}$$

где $p = 1/2 (n_1 + n_2 - |n_1 - n_2|)$; $L_p^m(x)$ — обобщенный полином Лагерра, а величина $|0, 0; t\rangle$ задается формулой (6.7), в которой $\alpha = \beta = 0$. Решение (6.8) переходит, как нетрудно проверить, в случае постоянного магнитного поля и равного нулю электрического поля в известные волновые функции, отвечающие состояниям с заданными энергией E_{n_1} и угловым моментом $l_z = n_2 - n_1$. Таким образом, хотя ни энергия, ни момент в рассматриваемой задаче не сохраняются, существуют квантовые числа, отвечающие начальному моменту и начальной энергии, которые полностью определяют решения и в последующие моменты времени. Этим показано, что квантовые числа в данной задаче являются точными инвариантами.

Легко проверить, что в когерентном состоянии (6.7) распределения по квантовым числам n_1 и n_2 являются распределениями Пуассона.

Поскольку для рассматриваемой задачи известны точные решения (6.7), образующие полную систему функций, легко найти выражение для функции Грина, которую можно получить из соотношения $G(2,1) = \pi^{-2} \int d^2\alpha d^2\beta |\alpha, \beta; 2\rangle \langle \alpha, \beta; 1|$, либо воспользоваться оператором (6.6) и известной функцией Грина для задачи без электрического поля. Опуская известный множитель, отвечающий свободному движению вдоль магнитного поля, имеем

для функции Грина следующее выражение:

$$G(x_2, y_2, t_2; x_1, y_1, t_1) = [2\pi i |\varepsilon(t_1) \varepsilon(t_2)| \sin \gamma]^{-1} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{i}{2} \left[\frac{R_2^2}{2} \frac{d|\varepsilon|^2}{dt_2} - \frac{R_1^2}{2} \frac{d|\varepsilon|^2}{dt_1} + (R_1 - R_2)^2 \operatorname{ctg} \gamma + 2 [R_1 \times R_2]_z \right] + \right. \\ \left. + i \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\omega^2}{4} |\zeta_0|^2 - |\dot{\zeta}_0|^2 \right) d\tau - i [\zeta_2 \dot{\zeta}_0^*(t_2) + \zeta_2^* \dot{\zeta}_0(t_2) - \zeta_1 \dot{\zeta}_0^*(t_1) - \zeta_1^* \dot{\zeta}_0(t_1)] \right\}, \quad (6.9)$$

где величины x_i, y_i, t_i выражаются через ζ_i по формулам (6.2), длины векторов R_i и величина γ даются равенствами

$$R_i = \sqrt{2} \frac{|\zeta_i + \zeta_0(t_i)|}{|\varepsilon(t_i)|}; \quad \gamma = \int_{t_1}^{t_2} |\varepsilon|^{-2} d\tau,$$

а разность углов между векторами R_1, R_2 имеет вид

$$\varphi_{R_2} - \varphi_{R_1} = \arg [\zeta_2 + \zeta_0(t_2)] - \arg [\zeta_1 + \zeta_0(t_1)] - \gamma.$$

Легко проверить, что при равном нулю электрическом поле ($\zeta_0 = 0$) формула (6.9) переходит в полученное выше выражение для функции Грина, а в случае постоянного магнитного поля ($\varepsilon = \varepsilon_c$) эта формула переходит в хорошо известное выражение, полученное в [90].

Рассмотрим теперь вопрос о вычислении матричных элементов U -матрицы для случая, когда до нулевого момента времени существовало постоянное магнитное поле ω_{in} , затем было включено переменное электрическое поле и начало меняться по величине магнитное поле, в далеком будущем электрическое поле выключается, а магнитное поле становится постоянным, равным ω_r . Легко вычислить U -матрицу в любой момент времени t ; U -матрица выражается через параметры $\xi(t), \eta(t), \delta_a(t)$ и $\delta_b(t)$, тесно связанные с решениями уравнений (6.4). Параметры $\xi(t)$ и $\eta(t)$ выражаются через решение $\varepsilon(t)$ и его производную $\dot{\varepsilon}(t)$:

$$\varepsilon(t) = (2/\omega_r)^{1/2} [\xi(t) \exp(i\omega_r t/2) - i\eta(t) \exp(-i\omega_r t/2)];$$

$$\dot{\varepsilon}(t) = i(\omega_r/2)^{1/2} [\xi(t) \exp(i\omega_r t/2) + i\eta(t) \exp(-i\omega_r t/2)],$$

причем $\varepsilon^* \dot{\varepsilon} - \varepsilon \dot{\varepsilon}^* = 2i$; $|\xi|^2 - |\eta|^2 = 1$.

При $t \rightarrow -\infty$ величина $\varepsilon(t)$ переходит в $(2/\omega_{in})^{1/2} \exp(i\omega_{in} t/2)$, а при $t \rightarrow \infty$ величины $\xi(t)$ и $\eta(t)$ являются постоянными комплексными числами.

Решения неоднородного уравнения (6.4) имеют вид

$$\zeta_0 = -2^{-1/2} (\delta_a \varepsilon^* + \delta_b^* \varepsilon);$$

$$\delta_a = -2^{-1/2} \int_0^t \varepsilon(\tau) F(\tau) d\tau; \quad \delta_b = -i2^{-1/2} \int_0^t \varepsilon(\tau) F^*(\tau) d\tau. \quad (6.10)$$

При $t < 0$ имеем $F(t) = 0$ и $\zeta_0 = 0$, а при $t \rightarrow \infty$ сила $F(t) = 0$ и $\delta_a(t)$ и $\delta_b(t)$ становятся постоянными числами. Конечные состояния $|\mu, \nu; t\rangle$ описывают когерентные состояния частицы в постоянном поле с частотой ω_f . Операторы A_f и B_f даются формулами (6.3), а явный вид этих состояний — формулой (6.7), причем в формулах (6.3) и (6.7) нужно положить

$$\zeta_0 = 0; \quad \varepsilon(t) = (2/\omega_f)^{1/2} \exp(i\omega_f t/2).$$

Операторы A и B связаны с A_f и B_f соотношениями

$$\begin{aligned} A &= \xi(t)A_f + \eta(t)B_f^\dagger + \delta_a(t); \\ B &= \xi(t)B_f + \eta(t)A_f^\dagger + \delta_b(t). \end{aligned} \quad (6.11)$$

Отметим, что оператор D (6.6) отличается только фазовым множителем от вейлевского оператора сдвига

$$D = \exp \left[i \int_0^t (F\zeta_0^* + F^*\zeta_0) d\tau + \delta_a A^\dagger - \delta_a^* A + \delta_b B^\dagger - \delta_b^* B \right]. \quad (6.12)$$

Амплитуда перехода из начального когерентного в конечное когерентное состояние может быть получена либо взятием интеграла, либо с использованием свойств операторов вейлевского сдвига и имеет вид

$$\begin{aligned} \langle \mu, \nu; f | \alpha, \beta; in \rangle &= \\ &= \xi^{-1} \exp \left\{ \delta_a \delta_b \frac{\eta^*}{\xi} - \frac{1}{2} (|\delta_a|^2 + |\delta_b|^2 + |\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\mu|^2 + |\nu|^2) + \right. \\ &+ \xi^{-1} [(\alpha - \delta_a)\mu^* + (\beta - \delta_b)\nu^* - \eta\mu^*\nu^* + \eta^*\alpha\beta + \alpha(\xi\delta_a^* - \eta^*\delta_b) + \\ &\left. + \beta(\xi\delta_b^* - \eta^*\delta_a)] + i \int_0^t (F\zeta_0^* + F^*\zeta_0) d\tau \right\}. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Можно вычислить производящую функцию для вероятностей перехода между уровнями Ландау

$$f(z_1, z_2, y_1, y_2) = \sum_{\substack{m_1=0, \\ n_1=0}}^{\infty} W_{m_1 m_2 n_1 n_2} z_1^{m_1} z_2^{n_1} y_1^{m_2} y_2^{n_2},$$

имеющую вид

$$\begin{aligned} f &= \Delta^{-1} \exp \{ (2\Delta)^{-1} [sz_1 + tz_2 + uy_1 + wy_2 + (s + t + u + w) \times \\ &\times y_1 y_2 z_1 z_2 - sy_1 y_2 z_1 - uz_1 z_2 y_2 - wz_1 z_2 y_1 - ty_1 y_2 z_1 - qy_1 y_2 - \\ &- (2u - q)y_1 z_1 - (2w - q)y_2 z_2 - (2s - 2u + q)z_1 z_2] - (s + \\ &+ t + u + w)/2 |\xi|^2 \}, \end{aligned} \quad (6.14)$$

где $\Delta = |\eta|^2 (y_1 y_2 - 1)(z_1 z_2 - 1) + (y_1 z_1 - 1)(y_2 z_2 - 1)$; $u = |\delta_a|^2$; $w = |\delta_b|^2$; $s = |\xi|^2 u + |\eta|^2 w - 2 \operatorname{Re}(\xi\eta\delta_a^*\delta_b^*)$; $t = s + w - u$; $q = u - s + (s + w)R$; $R = |\eta|^2 / |\xi|^2$.

Амплитуда перехода (6.13) не зависит при больших временах от переменной t , в чем легко убедиться дифференцированием. Комплексные константы ξ , η , δ_a , δ_b , определяющие асимптотику траекторий (6.10), полностью задают амплитуду перехода (6.13). Поскольку амплитуда (6.13) задает производящую функцию для амплитуд перехода между состояниями с заданными значениями энергии и углового момента $\langle m_1, m_2; f | n_1, n_2; \text{in} \rangle$, эти амплитуды легко сосчитать обычным дифференцированием. Имеем

$$\langle m_1, m_2; f | n_1, n_2; \text{in} \rangle = \frac{H_{n_1 n_2 m_1 m_2}(x_1, x_2, x_3, x_4)}{(m_1! m_2! n_1! n_2!)^{1/2}} \langle 0, 0; f | 0, 0; \text{in} \rangle. \quad (6.15)$$

Здесь $H_{n_1 n_2 m_1 m_2}$ — полином Эрмита от четырех переменных, причем $x_1 = \delta_a - \eta \delta_b^* / \xi^*$; $x_2 = \delta_b - \delta_a^* \eta / \xi^*$; $x_3 = -\delta_a^* / \xi^*$; $x_4 = -\delta_b^* / \xi^*$, а симметричная квадратичная форма $\varphi = a_{ik} x_i x_k$, задающая эти полиномы Эрмита, имеет четыре не равные нулю коэффициента: $a_{12} = -\eta^* / \xi$; $a_{34} = \eta / \xi$; $a_{24} = a_{31} = -1 / \xi$.

Интересно отметить, что полученная в [42] амплитуда перехода между энергетическими уровнями для осциллятора с переменной частотой, на который действует переменная вынуждающая сила, также вычисляется точно и выражается через полином Эрмита от двух переменных. Впервые амплитуды перехода для такого осциллятора вычислялись методом производящих функций в [85] (см. также [87]), в адиабатическом приближении — в [91]. Эти амплитуды строились также в [89] с помощью применения квадратичных инвариантов, явно зависящих от времени. Интегралы перекрытия, дающие вероятности перехода для осциллятора, исследовались в [93].

Представляет интерес рассмотреть амплитуду перехода начального когерентного состояния $|\alpha, \beta; \text{in}\rangle$ на уровни Ландау конечного состояния $|m_1, m_2; f\rangle$. Для этого необходимо продифференцировать производящую функцию, задаваемую формулой (6.13), по параметрам μ^* , ν^* . Имеем в результате

$$\begin{aligned} \langle m_1, m_2; f | \alpha, \beta; \text{in} \rangle &= \langle 0, 0; f | \alpha, \beta; \text{in} \rangle (m_1! m_2!)^{1/2} \times \\ &\times \frac{1}{[1/2(m_1 + m_2 + |m_1 - m_2|)]!} \left(-\frac{\eta}{\xi}\right)^p \left(\frac{\alpha - \delta_a}{\xi}\right)^{(m_1 - m_2 + |m_1 - m_2|)/2} \times \\ &\times \left(\frac{\beta - \delta_b}{\xi}\right)^{(m_2 - m_1 + |m_1 - m_2|)/2} L_p^{|m_1 - m_2|}(s), \quad (6.16) \end{aligned}$$

где $p = 1/2(m_1 + m_2 - |m_1 - m_2|)$; $s = (\xi\eta)^{-1}(\alpha - \delta_a)(\beta - \delta_b)$; $L_p^{|m_1 - m_2|}(s)$ — обобщенный полином Лагерра, а амплитуда $\langle 0, 0; f | \alpha, \beta; \text{in} \rangle$ задается формулой (6.13).

Полученные результаты легко переносятся на случай заряженного осциллятора, имеющего равные переменные частоты колебаний $\Omega(t)$ по осям x и y и частоту колебаний по оси z , равную $\omega_z(t)$, и движущегося в однородных полях $A = 1/2[H \times r]$; $\varphi = -E(t)r$; $E(t) = (E_1(t), E_2(t), E_3(t))$. Волновая функция

разбивается при этом на произведение двух функций $\Psi_1(x, y, t) \times \Psi_2(z, t)$. Функция, зависящая от переменных x и y , удовлетворяет уравнению

$$i \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} = - \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial \xi \partial \xi^*} + |\zeta|^2 \left(\frac{\omega^2}{4} + \Omega^2 \right) \Psi_1 + (F\zeta^* + E^*\zeta) \Psi_1, \quad (6.17)$$

где ζ дается формулой (6.2). Уравнение (6.17) сводится к уравнению (6.1) заменой $\omega(t) \rightarrow \sqrt{\omega^2(t) + 4\Omega^2(t)}$. Функция $\Psi_2(z, t)$, описывающая движение осциллятора вдоль магнитного поля, удовлетворяет уравнению Шредингера для осциллятора с переменной частотой $\omega_3(t)$, движущегося под действием вынуждающей силы, решенному выше. Амплитуды перехода, аналогичные (6.15), при этом факторизуются и выражаются через произведения полиномов Эрмита от двух и четырех переменных.

Таким образом, полностью решена общая задача о построении точных решений, когерентных состояний, функции Грина и амплитуд перехода для задачи о заряженном осцилляторе с переменной частотой в переменных электрическом и магнитном полях.

Инварианты и функция Грина динамических систем

§ 1. Инварианты (интегралы движения)

В предыдущей главе мы рассмотрели некоторые конкретные физические задачи; при этом выяснилось, что для различных квантовых систем имеет смысл проводить исследование по некоторой единой схеме. Так, и для осциллятора, и для заряда в магнитном поле мы находили сперва интегралы движения, причем найденные интегралы движения подбирались таким образом, чтобы удовлетворялись бозонные коммутационные соотношения. Важно, что в рассмотренных задачах интегралы движения находились в явном виде через операторы координат и импульсов. Затем строились решения уравнения Шредингера (когерентные состояния) с помощью интегралов движения и находилась функция Грина — тем самым получалось полное решение задачи. В настоящей главе мы покажем, что применявшаяся для обсужденных задач схема полезна и может использоваться для произвольных квантовых систем. Ключевым моментом при этом является наличие у произвольных динамических систем интегралов движения, с помощью которых проводится все рассмотрение. Обсудим поэтому в настоящем параграфе свойства инвариантов, или интегралов движения, а также рассмотрим вопрос, сколькими инвариантами может обладать квантовая система. Иногда по этому вопросу имеются разночтения и различная трактовка. Очень важным моментом в нашем рассмотрении служит предположение, что у обсуждаемой квантовой системы при всех временах $t > 0$ имеется оператор эволюции $U(t)$ такой, что существуют $U^{-1}(t)$ и $U^\dagger(t)$ и имеет место условие унитарности $UU^\dagger = 1$. Мы считаем, таким образом, что ядро оператора эволюции (функция Грина или амплитуда перехода) существует для рассматриваемой системы. Это очень широкий класс квантовых систем. Практически квантовая механика только такие системы и рассматривает, поскольку описание квантовой системы на языке функций Грина эквивалентно описанию на языке волновых функций $\Psi(t) = U(t)\Psi(0)$ и существование оператора эволюции эквивалентно существованию волновой функции.

Если у квантовой системы существует оператор эволюции U , то можно построить $2N$ (где N — число степеней свободы систе-

мы) интегралов движения q_0 и p_0 по следующим формулам:

$$q_0 = UxU^{-1}; \quad p_0 = -i\hbar U \frac{\partial}{\partial x} U^{-1}. \quad (1.1)$$

(Эти формулы являются определением операторов q_0 и p_0 .) Действительно, главным свойством операторов (интегралов движения) является то, что среднее от них не зависит от времени. Если вычислить среднее от оператора q_0 по состоянию $\Psi(t=0) = \Psi_0$ в начальный момент времени, мы получим

$$\langle q_0 \rangle_{t=0} = \langle \Psi_0 | x | \Psi_0 \rangle, \quad (1.2)$$

т. е. среднее значение координаты в начальный момент времени. Вычислив среднее от оператора q_0 в момент времени t , получим

$$\langle q_0 \rangle_t = \langle \Psi_t | q_0 | \Psi_t \rangle = \langle U\Psi_0 | UxU^{-1} | U\Psi_0 \rangle. \quad (1.3)$$

Учитывая унитарность оператора эволюции и свойства средних в формализме Дирака, имеем

$$\langle q_0 \rangle_t = \langle \Psi_0 | U^\dagger UxU^{-1} U | \Psi_0 \rangle = \langle q_0 \rangle_0. \quad (1.4)$$

Таким образом, физический смысл оператора q_0 состоит в том, что он описывает начальную координату системы. Аналогично, физический смысл оператора — инварианта p_0 — состоит в том, что он описывает сохраняющееся значение начального среднего импульса системы. По теореме Стоуна — фон Неймана $2N$ операторов q_0 и p_0 образуют полный набор. Их коммутационные соотношения совпадают с коммутационными соотношениями оператора координат x и импульсов — $i\hbar \partial/\partial x$. Любая функция от операторов q_0 и p_0 является интегралом движения. Поэтому можно образовывать различные алгебраические выражения от операторов q_0 и p_0 с удобными коммутационными соотношениями, которые также будут инвариантами, причем, возможно, зависимыми инвариантами. Так, можно образовать различные алгебры Ли, генераторы которых строятся из $2N$ операторов q_0 и p_0 .

Обсудим теперь связь операторов q_0 и p_0 с гейзенберговскими операторами x_G и p_G . Заметим, что, хотя операторы q_0 и p_0 похожи на операторы координат и импульсов в представлении Гейзенберга, они отличаются от них, — и это существенно, особенно для нестационарных квантовых систем. Операторы координаты и импульса в представлении Гейзенберга строятся из операторов x и $-i\hbar \partial/\partial x$ с помощью оператора эволюции по формулам $x_G = U^{-1}xU$ и $p_G = -i\hbar U^{-1}(\partial/\partial x)U$.

В силу одинаковости коммутационных соотношений эрмитовых операторов $q_0 = UxU^{-1}$ и $p_0 = U(-i\hbar \partial/\partial x)U^{-1}$ и операторов координат и импульсов в представлении Гейзенберга x_G и p_G , по теореме Стоуна — фон Неймана существует каноническое преобразование S , переводящее операторы x_G и p_G в q_0 и p_0 , которое имеет вид

$$x_G = (U^\dagger)^2 q_0 U^2; \quad p_G = (U^\dagger)^2 p_0 U^2. \quad (1.5)$$

В случае стационарных гамильтонианов эта связь приводит к соотношениям $x_G(-t) = q_0(t)$ и $p_G(-t) = p_0(t)$. В случае нестационарных гамильтонианов $\mathcal{H}(t)$ эти равенства места не имеют.

Можно указать еще одно полезное соотношение. Если мы введем новый гамильтониан $\mathcal{H}(t) = -\mathcal{H}_G(t)$ и построим операторы координаты \underline{x}_G и импульса \underline{p}_G в гейзенберговском представлении, связанном с этим гамильтонианом $\mathcal{H}(t)$, то операторы q_0 и p_0 — интегралы движения исходной системы с гамильтонианом $\mathcal{H}(t)$ — совпадают с операторами $\underline{x}_G(t)$ и $\underline{p}_G(t)$. Задача нахождения интегралов движения $q_0(t)$ и $p_0(t)$ технически эквивалентна задаче нахождения операторов координаты и импульса в гейзенберговском представлении x_G и p_G или \underline{x}_G и \underline{p}_G , но надо отдавать себе отчет в том, что по физическому смыслу и по дальнейшему применению эти операторы существенно различны, что было продемонстрировано при решении конкретных задач в предыдущих главах. Указанные замечания относятся и ко всем другим операторам — интегралам движения, которые можно построить из инвариантов q_0 и p_0 .

Доказанное формулами (1.1) — (1.5) наличие у квантовой системы с N степенями свободы $2N$ интегралов движения q_0 и p_0 отражает факт наличия аналогичных интегралов у соответствующей классической системы. Существование квантовых интегралов q_0 и p_0 совершенно понятно, если исходить из принципа соответствия, который, не являясь доказательством, служит наводящим соображением для построения квантовых интегралов движения q_0 и p_0 на основе рассмотрения классических интегралов движения.

Итак, подойдем к этому вопросу, следуя [67, 77, 78, 80], с точки зрения связи классической и квантовой механики. Известно, что классическая динамическая система описывается уравнениями движения второго порядка. Если проводить описание на языке уравнений Гамильтона $\dot{q} = \partial\mathcal{H}/\partial p$ и $\dot{p} = -\partial\mathcal{H}/\partial q$, $q = (q_1, \dots, q_N)$, $p = (p_1, \dots, p_N)$, то имеется система $2N$ (N — число степеней свободы системы) уравнений первого порядка. Решение этой системы полностью определяется $2N$ постоянными, которые могут быть выбраны как координаты начальной точки классической траектории в фазовом пространстве координат q и импульсов p . Таким образом, движение классической системы описывается зависимостями $q(t) = q(q_0, p_0, t)$; $p(t) = p(q_0, p_0, t)$; $T > t > 0$. Если разрешить эти соотношения (что всегда можно сделать однозначно для достаточно малых T , считая точку (q_0, p_0) неособой), выразив начальные точки q_0 и p_0 через величины q, p, t , то получаются функции траекторий $q_0(q, p, t)$ 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. Отметим, что функциональная зависимость q_0 и p_0 от классиче-

ских координат и импульсов может сильно отличаться от соответствующих квантовых формул. Однако каноническое преобразование от классической точки (q_0, p_0) к достаточно близкой точке $(q(t), p(t))$ задается классической производящей функцией, которая соответствует в квантовом случае оператору эволюции $U(t)$ (см., например, [196]).

Перейдем теперь к обсуждению квантового случая. Поскольку имеется принцип соответствия классической и квантовой механики 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 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 (в частности, их коммутаторы и антикоммутаторы) сама является оператором — интегралом движения. Поэтому и 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 свободного движения с гамильтонианом $\mathcal{H} = p^2/2m$ 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 $q_0 = x + i\hbar t \times \times \partial/\partial (mx)$. Интегралы движения, отвечающие дискретным симметриям типа оператора четности, не входят в обсуждаемый набор $2N$ интегралов движения.

§ 2. Инварианты и динамическая симметрия уравнения Шредингера

Существует замечательная связь между операторами симметрии B_α уравнения Шредингера и интегралами движения. А именно, инварианты квантовой системы одновременно являются операторами симметрии этой системы в смысле определения (3.3), данного в гл. I. Действительно, операторы симметрии B_α в этом смысле должны удовлетворять условию

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H}, B_\alpha \right] \Psi = 0, \quad (2.1)$$

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

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi | I_\alpha | \Psi \rangle = 0. \quad (2.2)$$

Это означает, что

$$\langle \dot{\Psi} | I_\alpha | \Psi \rangle + \langle \Psi | \dot{I}_\alpha | \Psi \rangle + \langle \Psi | I_\alpha | \dot{\Psi} \rangle = 0;$$

или

$$\langle \Psi \left| \left\{ \frac{i}{\hbar} (\mathcal{H}^\dagger I_\alpha - I_\alpha \mathcal{H}) + \frac{\partial I_\alpha}{\partial t} \right\} \right| \Psi \rangle = 0. \quad (2.3)$$

Если $\mathcal{H}^\dagger = \mathcal{H}$, то достаточным условием выполнения (2.2) является условие, определяющее инвариант I_α :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}, I_\alpha \right] \Psi = 0, \quad (2.4)$$

что эквивалентно (2.1). Таким образом, интеграл движения I_α (и любая функция от него) переводит решение уравнения Шредингера в другое решение. Это очень важное свойство, существенно используемое во всех последующих построениях.

Обычное определение интеграла движения в квантовой механике является частным случаем данного определения (2.4). Дело в том, что обычно используется более сильное условие тождественной коммутации

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \mathcal{H}, I_\alpha \right] = 0,$$

не являющееся необходимым для (2.2). Условие (2.4) слабее.

В работе Барута [8] при рассмотрении спектра энергий стационарной квантовой системы было введено понятие динамической группы квантовой системы как группы, операторы которой включают и такие, которые переводят состояния, принадлежащие одному уровню энергии, в состояния с другими энергиями. Почти одновременно аналогичные понятия были введены под названием «группы неинвариантности» в работе [10] и под названием «алгебры, генерирующей спектр» в работе [9]. По существу, эти понятия являются частными случаями понятия симметрии уравнения Шредингера в смысле определения, данного в гл. I. Дело в том, что для стационарных систем, для которых существуют уровни энергии, алгебра, генерирующая спектр, состоит из операторов, которые являются как раз операторами, переводящими одно решение (с заданной энергией) в другое (с заданной энергией). Смысл введения групп неинвариантности заключался в том, чтобы собрать все уровни энергии в один мультиплет (в одно неприводимое представление) этой группы (названной группой, генерирующей спектр энергий). Для того чтобы обобщить понятие алгебры, генерирующей спектр (мы назовем эту новую алгебру алгеброй, генерирующей состояния), на системы, для которых энергия не является инвариантом (на нестационарные системы), следует воспользоваться определением (3.3) гл. I. Найдя достаточное количество интегралов движения, в частности взяв интегралы движения (1.4), можно построить алгебру, генерирующую состояния системы. В качестве такой алгебры может быть взята алгебра Гейзенберга, состоящая из единичного оператора и операторов (1.4), поскольку по теореме Стоуна — фон Неймана операторы (1.4) в пространстве состояний квантовой системы не имеют

инвариантных подпространств. Из операторов (1.1) можно строить и другие алгебры, генерирующие состояния, например алгебру неоднородной симплектической группы $I \text{Sp}(2N, R)$ или группы $U(N, 1)$. Поскольку указанные утверждения базируются только на существовании интегралов движения (1.1), то можно считать, что для произвольной квантовой системы существует алгебра, генерирующая состояния $I \text{Sp}(2N, R)$ или $U(N, 1)$.

С помощью группы Гейзенберга с генераторами (1.1) можно из одного-единственного состояния построить все остальные состояния. Классификацию состояний квантовых систем можно производить, используя разные алгебры, генерирующие состояния, что эквивалентно решению уравнения Шредингера в разных координатах. Разумеется, все вышесказанное относится и к другим уравнениям (в частности, Дирака и Клейна — Гордона). Алгебра, генерирующая спектр (группа неинвариантности), является частным случаем алгебры, генерирующей состояния. Например, алгеброй, генерирующей состояния атома водорода, является алгебра конформной группы $O(4, 2)$ (см. [11, 80]), совпадающая в этом стационарном случае с алгеброй, генерирующей спектр энергий.

§ 3. Когерентные состояния произвольных квантовых систем

Перейдем теперь к построению когерентных состояний произвольной квантовой системы [67, 77—80]. Для этого введем интегралы движения — операторы рождения и уничтожения

$$A^\dagger = 2^{-1/2} (q_0 - ip_0); \quad A = 2^{-1/2} (q_0 + ip_0), \quad (3.1)$$

удовлетворяющие стандартным коммутационным соотношениям $[A_\alpha, A_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha\beta}$. Заметим, что, поскольку любая функция от интегралов движения является также интегралом движения, можно было бы выбрать и другие независимые интегралы движения, совершив каноническое преобразование $A' = SAS^{-1}$ в фазовом пространстве (в частности, симплектическое), не нарушающее коммутационных соотношений. Это индуцировало бы преобразование операторов рождения и уничтожения.

В чем физический смысл интегралов движения A, A^\dagger ? Если в начальный момент времени $t = 0$ операторы q_0 и p_0 совпадают с обычными координатами и импульсами, то это означает, что средние координаты фазового пространства, фиксированные в нулевой момент времени, 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. [94—98]):

$$A_\mu |\alpha\rangle = \alpha_\mu |\alpha\rangle. \quad (3.2)$$

Таким образом, когерентные состояния произвольной квантовой системы всегда существуют, если существует оператор эволюции $U(t)$ (функция Грина). Тогда формально, пользуясь свойствами операторов q_0 и p_0 , можно построить выражения для когерентных состояний. Иным способом когерентные состояния строились в работах [204, 205]. Можно, кроме того, строить состояния, часто также называемые в литературе когерентными или обобщенными когерентными (имеются и другие названия), отталкиваясь не от операторов q_0 и p_0 , а от функций этих операторов $I_\alpha(q_0, p_0)$. В частности, операторы I_α могут образовывать алгебру Ли. Обычно строят состояния с помощью этих операторов, взятых в момент времени $t = 0$. Мы можем строить когерентные состояния с учетом временной зависимости (см. [205, 130]). Основное свойство всех таких когерентных состояний состоит в том, что они удовлетворяют временному уравнению Шредингера и образуют неортогональные полные (и всегда переполненные) системы функций, зависящих от непрерывных параметров. Причем для одной и той же квантовой системы можно строить совершенно различные наборы таких состояний. В математическом плане такие состояния весьма удобны, поскольку они служат производящими функциями для волновых функций с дискретными индексами, а аппарат производящих функций эффективен для исследования рекуррентных соотношений, асимптотик, вычисления интегралов перекрытия и т. д.

Существенным моментом является тот факт, что мы строим когерентные состояния не с помощью какого-то произвольного оператора уничтожения \tilde{A} , а именно с помощью интеграла движения. Это существенно облегчает расчеты и позволяет легко строить когерентные состояния нестационарных систем, что было использовано в [67—80]. Вектор α 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

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \exp(-|\alpha|^2/2 - |\beta|^2/2 + \alpha^* \beta); \quad (3.3)$$

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

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 фокковское представление для таких систем. Поскольку когерентное состояние $|\alpha\rangle$ задает производящую функцию для состояний $|n\rangle$, являющихся собственными состояниями квадратичных операторов $A_\mu^\dagger A_\mu$ (см. [94]), легко построить эти состояния, дифференцируя функцию $e^{|\alpha|^2/2} |\alpha\rangle$ по переменным α :

$$|n\rangle = \frac{(n_1! \dots n_N!)^{1/2}}{(2\pi i)^N} \oint \dots \oint \frac{e^{|\alpha|^2/2} |\alpha\rangle d\alpha_1 \dots d\alpha_N}{\alpha_1^{n_1+1} \dots \alpha_N^{n_N+1}}; \quad (3.4)$$

здесь замкнутые контуры интегрирования в плоскостях комплексных переменных α_μ охватывают начало координат.

Проведенные рассуждения показывают, 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 $|n\rangle$ полна ($\sum |n\rangle \langle n| = I$), причем эти функции ортогональны ($\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$). Явный вид функций $|n\rangle$ легко получить в случае квадратичного гамильтониана, поскольку для него оператор эволюции (квадратичная экспонента) сохраняет первоначальный функциональный вид состояния $|n, \theta\rangle$ (полином Эрмита). В случае же неквадратичного гамильтониана оператор эволюции таков, что изменяет функциональный вид начального состояния $|n, \theta\rangle$.

Распределение вероятностей в когерентном состоянии с заданными числами n_μ является распределением Пуассона

$$|\langle \alpha | n \rangle|^2 = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \prod_{\mu=1}^N \frac{|\alpha_\mu|^{2n_\mu}}{n_\mu!}. \quad (3.5)$$

Возможность построения когерентных состояний $|\alpha\rangle$ и состояний $|n\rangle$ 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:

$$G(2,1) = \pi^{-N} \int d^2\alpha \langle x_2 | \alpha; t_2 \rangle \langle \alpha; t_1 | x_1 \rangle. \quad (3.6)$$

Эта формула аналогична формуле разложения функции Грина по любой полной системе функций, например по функциям $|n\rangle$:

$$G(2,1) = \sum_n \langle x_2 | n; t_2 \rangle \langle n; t_1 | x_1 \rangle. \quad (3.7)$$

Однако если вспомнить физический смысл переменной α , 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 α как раз хватает для получения требуемого выражения. Это связано, в частности, с тем, что классическая система описывается уравнениями второго порядка. При квантовом рассмотрении 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 $\epsilon \rightarrow 0$ [99]. 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 $\epsilon \rightarrow 0$ при этом существует и дает функцию Грина. Из проведенного рассмотрения вытекает, что, если соединять концы интервала ϵ кривыми, задаваемыми большим числом параметров, чем два, 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 [100].

Обсудим еще один аспект связи когерентных состояний и интегралов движения с фейнмановской формулировкой квантовой механики. Для этого перепишем формулы для инвариантов q_0 и p_0 (1.4) в несколько иной форме. Запишем ядра интегралов движения q_0 и p_0 как интегралы по траекториям. Поскольку ядро опе-

ратора эволюции U (функция Грина) в координатном представлении дается в формулировке Фейнмана выражением (рассмотрим одномерное движение)

$$G(x_2, t_2; x_1, t_1) = \int_{x_1}^{x_2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x_2, t_2; x_1, t_1) \right] \mathcal{D}x(t), \quad (3.8)$$

где классическое действие $S = \int_{t_1}^{t_2} L(x, \dot{x}, \tau) d\tau$ определяется через лагранжиан L системы и $\mathcal{D}x(t)$ — мера в функциональном интеграле, мы можем выписать ядро оператора — интеграла движения q_0 — в виде ($t_1 = 0$, $t_2 = t$)

$$q_0(x, y, t) = \int_{x'}^x dx' \int_{x''}^y dx'' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S(x, x', t) - S^*(y, x'', t)] \right\} \mathcal{D}x(t) \mathcal{D}^*y(t). \quad (3.9)$$

Здесь мы использовали то, что ядро оператора координат x имеет в координатном представлении вид $x(x_1, x_2) = x_1 \delta(x_1 - x_2)$. Аналогично можно выписать ядро оператора — инварианта p_0 ; оно имеет вид

$$p_0(x, y, t) = -i\hbar \iint dx' dx'' \left[\int_{x'}^x \int_{x''}^y \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S(x, x', t) - S^*(y, x'', t)] \right\} \mathcal{D}x(t) \mathcal{D}^*y(t) \right] \delta'(x' - x''). \quad (3.10)$$

Заметим, что интегралом движения является также оператор $\tilde{f}(q_0)$ с ядром

$$f(x, y, t) = \int \tilde{f}(x') dx' \int_{x'}^x \int_{x''}^y \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S(x, x', t) - S^*(y, x'', t)] \right\} \mathcal{D}x(t) \mathcal{D}^*y(t). \quad (3.11)$$

Аналогичное выражение пишется и для оператора произвольной функции импульса $\tilde{f}(p_0)$.

Можно выписать ядра этих же операторов — интегралов движения — в виде интегралов по фазовому пространству системы (в представлении когерентных состояний). Имеем следующее выражение для ядра $q_0(x, y, t)$ (см. [101]):

$$q_0(x, y, t) = \pi^{-2N} \int d^2\alpha d^2\alpha' dx' \langle x | \alpha; t \rangle \langle \alpha; 0 | x' \rangle x' \langle x' | \alpha; 0 \rangle \langle \alpha'; t | y \rangle, \quad (3.12)$$

и для ядра оператора начального импульса:

$$p_0(x, y, t) = \pi^{-2N} (-i\hbar) \int d^2\alpha d^2\alpha' dx' dx'' \langle x | \alpha; t \rangle \langle \alpha; 0 | x' \rangle \times \\ \times \delta'(x' - x'') \langle x'' | \alpha'; 0 \rangle \langle \alpha'; t | y \rangle. \quad (3.13)$$

Выражения (3.9) — (3.13) характерны тем, что в них можно при расчете использовать замены переменных в пространстве большего числа переменных, отвечающем удвоенному фазовому пространству систем (3.12), (3.13) или двойным интегралам по траекториям (3.9), (3.11).

Мы показали, что для произвольной квантовой системы можно ввести полные наборы когерентных $|\alpha; t\rangle$ и фоковских $|n; t\rangle$ состояний, диагонализировав операторы — инварианты A в первом случае и операторы — инварианты $A_\mu^\dagger A_\mu$ во втором. Можно также вводить и другие системы функций, диагонализировав полные наборы операторов — функций от инвариантов q_0 и p_0 . В частности, можно построить функции — собственные функции операторов q_0 (1.1); они определяются формулой

$$\Psi_{x_0}(x, t) = U \delta(x - x_0) = G(x, x_0; t)$$

и описывают развитие начальной функции, заданной в виде δ -функции — собственной функции оператора координаты. Можно построить и функции, описывающие развитие функции, заданной в начальный момент в виде плоской волны

$$\Psi_{p_0}(x, t) = (2\pi)^{-N/2} U e^{i p_0 x}.$$

Эта функция является собственной для оператора начального импульса p_0 . Можно строить также функции, собственные для квадратичных интегралов движения типа $p_{0\mu}^2 - q_{0\mu}^2$ или операторов $q_{0\mu} p_{0\mu}$. Все эти функции определяют полные наборы решений уравнения Шредингера, существующие для произвольных квантовых систем. Ниже на примере квадратичных систем мы будем строить их в явном виде.

Гамильтон показал (см. [401]), что уравнения движения $\dot{p} = -\partial\mathcal{H}/\partial q$, $\dot{q} = \partial\mathcal{H}/\partial p$ сразу интегрируются, если использовать функцию действия S , удовлетворяющую условию каноничности

$$\sum_i p_i dq_i - \mathcal{H} dt = dS + \sum_i p_i^0 dq_i^0.$$

Для интегрирования уравнений Гамильтона достаточно знать функцию S как функцию начальной координаты q_i^0 и текущей координаты q_i . Тогда имеем первые интегралы $p_i^0 = -\partial S/\partial q_i^0$. Текущие импульсы находим по формуле $p_i = \partial S/\partial q_i$. Квантовым аналогом метода Гамильтона построения первых интегралов p_i^0 и q_i^0 с помощью функции действия $S(q, q_0)$ является изложенный метод построения квантовых интегралов движения p_0 и q_0 с

помощью оператора эволюции $U(t)$ (см. (1.1) — (1.5)). Можно показать, используя результаты работы Фока [195], что в квазиклассическом приближении интегралы движения p_0 переходят в первые интегралы $p_i^0 = -\partial S/\partial q_i^0$, что для квадратичных систем обсуждается в § 3 гл. V.

§ 4. Когерентные состояния систем с квадратичным гамильтонианом

Рассмотренные в предыдущих параграфах примеры квантовых систем позволяют сделать обобщение на системы, описываемые гамильтонианом, являющимся нестационарной квадратичной формой общего вида (включая линейные члены). Точное решение волнового уравнения для такого гамильтониана (без линейных членов) было получено Черниковым [102]. Следуя предложенной выше схеме (см. работы [43, 76, 103]), построим для такой системы инварианты, когерентные состояния, функцию Грина, амплитуды и вероятности переходов между уровнями энергий.

Рассмотрим систему с N степенями свободы и с эрмитовым гамильтонианом вида

$$\mathcal{H}(t) = Q_i B_{ik}(t) Q_k + C_i(t) Q_i \quad (\hbar = c = 1); \quad i, k = 1, \dots, N, \quad (4.1)$$

где $Q_1 = p_1, Q_2 = p_2, \dots, Q_N = p_N, Q_{N+1} = q_1, Q_{N+2} = q_2, \dots, Q_{2N} = q_N$; эрмитова матрица $B(t)$ и действительный вектор $C(t)$ являются заданными функциями времени. В дальнейшем формы типа (4.1) будем записывать в виде $\mathcal{H} = QBQ + CQ$. В системе (4.1) существует $2N$ эрмитовых инвариантов, которые запишем в виде

$$I(t) = \Lambda(t) Q + \delta(t); \quad \dot{I} = i[I, \mathcal{H}], \quad (4.2)$$

где действительная матрица $\Lambda(t)$ и вектор $\delta(t)$, удовлетворяющие уравнениям $\dot{\Lambda} = i\Lambda\sigma_2(B + B^*)$, $\dot{\delta} = i\Lambda\sigma_2 C$ (причем σ_2 — блочная матрица Паули), находятся по формулам

$$\Lambda = \tilde{T} \exp \left[i \int_0^t \sigma_2 (B + B^*) d\tau \right]; \quad \delta = i \int_0^t \Lambda \sigma_2 C d\tau. \quad (4.3)$$

Легко убедиться, что $[I_i, I_k] = [Q_i, Q_k]$. Это ясно и без проверки, поскольку (4.2) соответствует развитию операторов координат и импульсов с помощью оператора эволюции $\tilde{T} = UQU^{-1}$, и в этой форме сохранение коммутационных соотношений очевидно. В качестве интегралов движения может быть выбран вектор $\tilde{I} = SI$, где S — симплектическая матрица, сохраняющая эрмитовость и коммутационные соотношения, что соответствует другому выбору начальных условий в (4.3) или каноническому преобразованию. Ясно, что оператор эволюции задает каноническое преоб-

разование такое же, как и в классической механике. Следуя схеме, вводим операторы уничтожения $A_\alpha = (iI_\alpha + I_{N+\alpha}) / \sqrt{2}$ такие, что $[A_\alpha, A_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha\beta}$, и строим когерентные состояния $|\alpha; t\rangle$ как собственные функции этих операторов. Для этого сначала построим «вакуум»:

$$\begin{aligned}
 |0; t\rangle &= \pi^{-N/4} \exp[-1/2 \mathbf{x} \mu \mathbf{x} + \mathbf{v}_0 \mathbf{x} + \varphi(t)]; \quad \mu = i\lambda_p^{-1} \lambda_q; \\
 \mathbf{v}_0 &= -i\lambda_p^{-1} \Delta; \quad \lambda_p = \lambda_3 + i\lambda_1; \quad \lambda_q = \lambda_4 + i\lambda_2; \quad \Delta_\alpha = i\delta_\alpha + \delta_{\alpha+N}; \\
 & \hspace{15em} (4.4) \\
 \varphi(t) &= \int_0^t d\tau [-\text{Sp}(b_2 + b_1 \lambda_p^{-1} \lambda_q) + i\Delta \tilde{\lambda}_p^{-1} b_1 \lambda_p^{-1} \Delta + ic_1 \lambda_p^{-1} \Delta].
 \end{aligned}$$

Здесь введены обозначения, отвечающие разбиению матриц B и Λ на блоки размерности:

$$B = \begin{vmatrix} b_1 & b_2 \\ b_3 & b_4 \end{vmatrix}; \quad \Lambda = \begin{vmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 \\ \lambda_3 & \lambda_4 \end{vmatrix}; \quad C = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}.$$

Вакуум (4.4) удовлетворяет уравнению Шредингера и условию $A_\alpha |0; t\rangle = 0$. В соответствии с отмечавшейся неоднозначностью выбора инварианта I , вакуум также выбирается неоднозначно, что отвечает рассмотрению задачи в различных системах координат в фазовом пространстве (\mathbf{q}, \mathbf{p}) , связанных каноническим преобразованием.

Физический смысл инвариантов I_α состоит в том, что их собственные числа задают начальные значения классической траектории в фазовом пространстве средних величин $\langle \mathbf{p} \rangle, \langle \mathbf{q} \rangle$. Когерентное состояние $|\alpha; t\rangle$ строится из (4.4) с помощью оператора сдвига $D(\alpha) = \exp(-|\alpha|^2/2 + \alpha A^\dagger) \exp(\alpha^* A)$. Поскольку A и A^\dagger — инварианты и α — постоянный комплексный вектор, $|\alpha; t\rangle$ удовлетворяет уравнению Шредингера и соотношению $A|\alpha; t\rangle = \alpha|\alpha; t\rangle$.

Запишем когерентное состояние в двух удобных для дальнейшего формах:

$$|\alpha; t\rangle = \pi^{-N/4} \exp(\sigma + \mathbf{v} \mathbf{x} - 1/2 \mathbf{x} \mu \mathbf{x}) \quad (4.5a)$$

и

$$|\alpha; t\rangle = |0; t\rangle \exp(-1/2 |\alpha|^2 + \mathbf{s} \alpha - 1/2 \alpha \omega \alpha), \quad (4.5b)$$

где

$$\begin{aligned}
 \sigma &= \varphi(t) - 1/2 |\alpha|^2 + 2^{-1/2} (\Delta^* - \Delta \tilde{\lambda}_p^{-1} \lambda_p^\dagger) \alpha + 1/4 \alpha (\lambda_p^* \lambda_p^{-1} \lambda_q \lambda_p^\dagger - \lambda_q^* \lambda_p^\dagger) \alpha; \\
 \mathbf{v} &= \mathbf{v}_0 + 2^{-1/2} (\lambda_q^\dagger - \lambda_p^{-1} \lambda_q \lambda_p^\dagger) \alpha; \quad \omega = i 2^{-1} (\lambda_q^* \lambda_p^\dagger - \lambda_p^* \lambda_p^{-1} \lambda_q \lambda_p^\dagger); \\
 \mathbf{s} &= 2^{-1/2} (\Delta^* - \lambda_p^* \lambda_p^{-1} \Delta + \lambda_q^* \mathbf{x} - \lambda_p^* \lambda_p^{-1} \lambda_q \mathbf{x}); \quad \mu = i\lambda_p^{-1} \lambda_q.
 \end{aligned} \quad (4.6)$$

Поскольку $|\alpha; t\rangle$ задает производящую функцию для собственных состояний операторов $A_\alpha^\dagger A_\alpha$, написав соответствующее раз-

ложение, легко получить решение $|\mathbf{n}; t\rangle$, где \mathbf{n} — векторы с положительными целыми компонентами, отвечающие энергетическому представлению

$$|\mathbf{n}; t\rangle = |\mathbf{0}; t\rangle (n_1! \dots n_N!)^{-1/2} H_{\mathbf{n}}(\tilde{\mathbf{x}}), \quad (4.7)$$

где $H_{\mathbf{n}}(\tilde{\mathbf{x}})$ — полином Эрмита от N переменных $\tilde{\mathbf{x}} = (\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_N)$, задаваемый матрицей μ . Свойства этих полиномов хорошо известны (см. [88]).

Интересны простые частные случаи: свободное движение ($\mathcal{H} = 1/2 p^2$, $b_1 = 1/2$, $b_2 = b_3 = b_4 = 0$) и перевернутый осцилятор ($\mathcal{H} = 1/2(p^2 - q^2)$, $b_1 = -b_4 = 1/2$, $b_2 = b_3 = 0$). В этих случаях спектр гамильтонианов не дискретен. Тем не менее в задачах существуют и вакуумы, и когерентные состояния, и решения (4.7). Это и очевидно, поскольку такие операторы эрмитовы и унитарный оператор эволюции (функция Грина, являющаяся квадратичной экспонентой) переводит пакеты, построенные в момент $t = 0$ в виде квадратичных экспонент (когерентные состояния) или полиномов Эрмита (см. (4.7)), в те же функции. Поэтому когерентны и энергетические состояния, причем бесконечное число их (симплектическая матрица S) существует для любых квадратичных систем.

Имея (4.56) и используя полноту системы когерентных состояний, легко получить явное выражение для функции Грина, беря гауссовский интеграл по начальным координатам в фазовом пространстве:

$$G(\mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_1, t_1) = 2^N |\mathbf{0}; 2\rangle \langle \mathbf{0}; 1| (\det P)^{-1/2} \exp(1/2 \mathbf{l} P^{-1} \mathbf{l}), \quad (4.8)$$

$$P = \begin{vmatrix} 2 + w(2) + w^*(1) & i[w(2) - w^*(1)] \\ i[w(2) - w^*(1)] & 2 - w(2) - w^*(1) \end{vmatrix};$$

$$\mathbf{l} = \begin{pmatrix} \mathbf{s}(2) + \mathbf{s}^*(1) \\ i\mathbf{s}(2) - i\mathbf{s}^*(1) \end{pmatrix}.$$

Матрицы $w(1)$, $w(2)$ и векторы $\mathbf{s}(1)$, $\mathbf{s}(2)$ определены формулами (4.6). Здесь и в дальнейшем используем известный интеграл (см. формулу (3.26) гл. II).

Получение функции Грина (4.8) интегрированием по когерентным состояниям (по координатам в фазовом пространстве) полностью эквивалентно взятию фейнмановского интеграла по классическим траекториям. Воспользуемся теперь свойствами когерентных состояний для расчета вероятностей возбуждения рассматриваемой системы. Будем считать, что при $t < 0$ и при $t \rightarrow \infty$ гамильтониан системы становится не зависящим от времени. В этих условиях существуют начальные и конечные состояния стационарной системы, между которыми происходят переходы. Амплитуда перехода из начального состояния $|\text{in}\rangle$ в конечное $|\text{f}\rangle$ дается матричным элементом $\langle \text{f} | t \rightarrow \infty \rangle$, где $|t \rightarrow \infty\rangle$ есть предел состояния $|t\rangle$ при $t \rightarrow \infty$. При этом подразумевается, что начальные условия выбраны правильно, т. е. состояние $|t\rangle$ сис-

темы в любой момент $t > 0$ дает развитие со временем соответствующего начального состояния $|\alpha; \text{in}\rangle$ и совпадает с ним при $t = 0$.

Амплитуда перехода $|\alpha; \text{in}\rangle \rightarrow |\beta; \text{f}\rangle$ между когерентными состояниями легко вычисляется взятием гауссовского интеграла по координатам:

$$\langle \beta; \text{f} | \alpha; t \rangle = \langle 0; \text{f} | 0; t \rangle \exp[-1/2(|\alpha|^2 + |\beta|^2) + S\xi - 1/2 \xi W \xi], \quad (4.9)$$

где

$$\xi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta^* \end{pmatrix}; \quad S = \begin{pmatrix} \rho^{-1/2} \tau (\tilde{\mu}_1 + \mu_1) \lambda_p^{-1} \Delta \\ -i 2^{-1} \tau_f^* (\tilde{\mu}_1 + \mu_1) \lambda_p^{-1} \Delta \end{pmatrix};$$

$$W = \begin{vmatrix} w - \tau \mu_1 \tilde{\tau} & -\tau \mu_1 \tau_f^\dagger \\ -\tau_f^* \mu_1 \tau & w_f^* - \tau_f^* \mu_1 \tau_f^\dagger \end{vmatrix}; \quad \mu_1 = (\mu + \mu_f^*)^{-1};$$

$$\rho = 2^{-1/2} (\Delta^* - \lambda_p^* \lambda_p^{-1} \Delta); \quad \tau = 2^{-1/2} (\lambda_q^* - \lambda_p^* \tilde{\lambda}_q \tilde{\lambda}_p^{-1}).$$

Амплитуда $\langle \beta; \text{f} | \alpha; t \rangle$ (функция Грина в представлении когерентных состояний) есть производящая функция для амплитуды $\langle m; \text{f} | n; t \rangle$ (функции Грина в дискретном фоковском базисе), связывающей начальное энергетическое состояние $|n; t\rangle$ с конечным $|m; \text{f}\rangle$. Из формулы (4.9), вспоминая формулу для производящей функции полиномов Эрмита от $2N$ переменных [88], сразу получим

$$\langle m; \text{f} | n; t \rangle = \frac{\langle 0; \text{f} | 0; t \rangle H_M(\tilde{W}^{-1} S)}{(n_1! \dots n_N! m_1! \dots m_N!)^{1/2}}, \quad (4.10)$$

где $M = (n_1, \dots, n_N, m_1, \dots, m_N)$, а $H_M(x)$ есть полином Эрмита от $2N$ переменных, определяемый с помощью матрицы W .

Мы можем вычислить производящую функцию $\varphi(u, v)$ для вероятностей перехода $|\langle m; \text{f} | n; t \rangle|^2$ по формулам

$$\varphi(u, v) = \pi^{-2N} \int \langle \beta; \text{f} | \alpha; t \rangle \langle v^* \alpha; t | u \beta; \text{f} \rangle d^2 \alpha_1 d^2 \beta_1 \dots d^2 \alpha_N d^2 \beta_N; \quad (4.11)$$

$$\varphi(u, v) = \sum_{\substack{n_j=0 \\ m_j=0}}^{\infty} |\langle m; \text{f} | n; t \rangle|^2 u_1^{m_1} \dots u_N^{m_N} v_1^{n_1} \dots v_N^{n_N},$$

где $u = \text{diag}(u_1, u_2, \dots, u_N)$; $v = \text{diag}(v_1, v_2, \dots, v_N)$; $|u_j| = |v_j| = 1$.

Вычисление гауссовского интеграла в (4.11) дает следующий результат:

$$\varphi(u, v) = 2^{2N} |\langle 0; \text{f} | 0; t \rangle|^2 (\det \mathcal{P})^{-1/2} \exp(1/2 L \mathcal{P}^{-1} L), \quad (4.12)$$

где

$$\mathcal{P} = \begin{vmatrix} 2 + E & D \\ 0 & 2 + F \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} V\sigma_3 & 0 \\ 0 & V\sigma_3 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \sigma_3 E^* \sigma_3 & \sigma_3 D^* \sigma_3 \\ 0 & \sigma_3 F^* \sigma_3 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} V\sigma_3 & 0 \\ 0 & V\sigma_3 \end{vmatrix};$$

$$E = \begin{vmatrix} w_1 & iw_1 \\ iw_1 & -w_1 \end{vmatrix}; \quad D = \begin{vmatrix} w_2 + \tilde{w}_3 & i(w_2 + \tilde{w}_3) \\ -i(w_2 + \tilde{w}_3) & -w_2 - \tilde{w}_3 \end{vmatrix}; \quad F = \begin{vmatrix} w_4 & iw_4 \\ iw_4 & -w_4 \end{vmatrix}; \quad (4.13)$$

$$U = \begin{vmatrix} u & 0 \\ 0 & u \end{vmatrix}; \quad V = \begin{vmatrix} v & 0 \\ 0 & v \end{vmatrix}; \quad L = \begin{pmatrix} (1+v)s_1 \\ (1-v)s_1 \\ (1+u)s_2 \\ (1-u)s_2 \end{pmatrix}.$$

Мы разбили матрицу W на блоки порядка N : $W = \begin{vmatrix} w_1 & w_2 \\ w_3 & w_4 \end{vmatrix}$, и аналогично вектор $S = \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix}$. Таким образом, \mathcal{P} есть матрица размером $4N \times 4N$, вектор L имеет $4N$ компонент.

Для перехода вакуум — вакуум имеем

$$\langle 0; f | 0; t \rangle = 2^{N/2} (\det \mu_1)^{1/2} \exp(\varphi + \varphi_f^* + 1/2 v_0 \mu_1 v_0), \quad (4.14)$$

где $\mu_1 = (\mu + \mu_f)^{-1}$, $v_0 = -i\lambda_p^{-1} \Delta$.

Полученные формулы полностью решают задачу о поведении любой квадратичной системы. Отметим, что получение в явном виде интегралов движения, когерентных состояний и амплитуд перехода для таких систем отвечает возможности вычислить для них явно гауссовский интеграл по траекториям. Все рассматривавшиеся до сих пор задачи с когерентными состояниями являлись частными случаями именно квадратичных систем.

§ 5. Инварианты и функция Грина

В работах [104—107] был выяснен еще один аспект интегралов движения (1.1). Оказывается, что функция Грина является решением нового уравнения, определяемого инвариантами q_0 , p_0 . Так, из физического смысла функции Грина как амплитуды перехода из начальной точки в конечную и физического смысла интеграла движения q_0 как оператора начальной координаты вытекает, что

$$q_0(x) G(x, x_0, t) = x_0 G(x, x_0, t). \quad (5.1)$$

Это легко проверить, исходя из соотношений (1.1) и из того, что $G(x, x_0, t) = U(t) \delta(x - x_0)$. Можно легко доказать справедливость еще одного соотношения, а именно:

$$p_0(x) G(x, x_0, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} G(x, x_0, t), \quad (5.2)$$

а также соотношения

$$\underline{q}(x_0) G(x, x_0, t) = x G(x, x_0, t); \quad (5.3)$$

здесь $\underline{q}(x) = U^T x (U^T)^{-1}$, а $\underline{q}(x_0)$ действует в (5.3) на переменную x_0 .

Соотношения (5.1) и (5.2) можно переписать также в форме, использующей представление функции Грина системы через интеграл по траектории, а именно:

$$q_0(x) \int_{x_0}^x \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x, x_0, t) \right] \mathcal{D}x(t) = \\ = x_0 \int_{x_0}^x \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x, x_0, t) \right] \mathcal{D}x(t) \quad (5.4)$$

и

$$p_0(x) \int_{x_0}^x \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x, x_0, t) \right] \mathcal{D}x(t) = \\ = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} \int_{x_0}^x \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x, x_0, t) \right] \mathcal{D}x(t). \quad (5.5)$$

Эти соотношения, разумеется, справедливы для произвольных динамических систем, т. е. систем, описываемых уравнениями типа уравнения Шредингера и обладающих операторами эволюции. Часть уравнений (5.4), (5.5), а именно уравнения (5.4), была написана для интеграла по траекториям произвольной динамической системы в работе [108].

Соотношения (5.1), (5.2) или (5.1), (5.3) определяют функцию Грина с точностью до фазового множителя, зависящего от времени и определяемого из уравнения Шредингера. Часто оказывается, что решать систему уравнений (5.1), (5.2) гораздо легче, чем обычное уравнение для функции Грина, если, конечно, независимо известен явный вид всех интегралов движения, которые необходимо находить заранее. Как 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 $q_0(t), p_0(t)$, так и в квантовой механике знание всех интегралов движения дает возможность определить эволюцию системы, т. е. найти функцию Грина. Докажем соотношения (5.1), (5.2). Введем для удобства $2N$ -мерный вектор $q = (p, x)$. Тогда формулы (1.1) принимают вид $Q = UqU^{-1}$. Отсюда сразу следуют уравнения (5.1), (5.2), поскольку если $QU = Uq$, то для ядра G оператора U выполняется уравнение $Q(x)G = q^T(x_0)G$. Коммутационные соотношения операторов Q_j сохраняют свой вид в любые моменты времени, что аналогично сохранению скобок Пуассона, вычисленных для координат и импульсов q_0 и p_0 и связанных с ними каноническим (касательным) преобразованием координат q и p .

Поясним, следуя [104], вывод соотношений (5.1), (5.2) следующим способом. Заметим, что в начальный момент времени функция Грина равна δ -функции:

$$G(x, x_0; +0) = \delta(x - x_0); \quad G(x, x_0, t) = U\delta(x - x_0), \quad (5.6)$$

и что действие оператора q на δ -функцию как на функцию первого аргумента x равно действию транспонированного оператора q^T на $\delta(x - x_0)$ как на функцию второго аргумента x_0 :

$$q(x)\delta(x - x_0) = q^T(x_0)\delta(x - x_0) \quad (5.7)$$

(запись $I(x)\Psi(x, y)$ означает, что оператор I действует на функцию Ψ как на функцию от переменной x , а y при этом считается параметром; напомним, что $x^T = x$, $p^T = -p$).

Действуя на обе части равенства (5.7) оператором эволюции U , получим

$$(Uq)(x)\delta(x - x_0) = (UqU^{-1}U)(x)\delta(x - x_0) = Q(x)G(x, x_0, t);$$

$$U(x)q^T(x_0)\delta(x - x_0) = q^T(x_0)U(x)\delta(x - x_0) = q^T(x_0)G(x, x_0, t).$$

Следовательно, функция Грина удовлетворяет следующей системе из $2N$ уравнений:

$$Q(x)G(x, x_0, t) = q^T(x_0)G(x, x_0, t). \quad (5.8)$$

Эти уравнения — краткая форма записи соотношений (5.1), (5.2):

$$q_0(x)G(x, x_0, t) = x_0G(x, x_0, t); \quad (5.9a)$$

$$p_0(x)G(x, x_0, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} G(x, x_0, t). \quad (5.9b)$$

Функция Грина $G(x, x_0, t)$ является собственной функцией оператора начальной координаты q_0 . Этот факт является, очевидно, следствием определения функции Грина как амплитуды вероятности перехода из начальной точки x_0 в конечную точку x и физического смысла интеграла движения q_0 . Система уравнений (5.9a) является совместной, поскольку все операторы $q_{0,i}$ коммутируют друг с другом. Эти уравнения определяют функцию Грина с точностью до произвольного множителя, зависящего от x_0, t : $G(x, x_0, t) = G_0(x, x_0, t)f(x_0, t)$, функция $f(x_0, t)$ может быть получена из уравнений (5.9b) простым интегрированием. Уравнения (5.9) дают функцию Грина с точностью до множителя, зависящего только от времени. Чтобы найти этот множитель, следует подставить функцию $G(x, x_0, t)$ в уравнение Шредингера и учесть начальное условие (5.6).

В уравнения (5.8) переменные x и x_0 входят несимметрично. Можно написать вместо (5.9b) уравнение, по форме аналогичное (5.9a), но в котором x и x_0 меняются ролями. Для этого введем оператор $Y = \underline{q}(x)$:

$$Y = U^T x (U^T)^{-1} = (U^{-1} x U)^T. \quad (5.10)$$

Для доказательства соотношения (5.3) достаточно учесть, что $G(x, x_0, t) = U^T(x_0) \delta(x - x_0)$. Сравнивая формулу (5.10) с вытекающим из (1.1) соотношением $x = U^{-1}q_0U$, можно получить следующий рецепт для построения оператора Y . Допустим, что оператор x можно выразить как функцию от операторов q_0 и p_0 : $x = f(q_0, p_0)$. Тогда оператор Y можно представить в следующем виде:

$$Y = [f(x, p)]^T.$$

Хотя в начальный момент времени оператор Y совпадает с оператором x , он не является интегралом движения для системы с гамильтонианом \mathcal{H} , так как Y удовлетворяет не уравнению (2.4), а уравнению

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H}', Y \right] \Psi = 0; \quad \mathcal{H}' = (U^{-1} \mathcal{H} U)^T. \quad (5.11)$$

Если гамильтониан \mathcal{H} от времени не зависит, то операторы \mathcal{H} и U коммутируют, так как в этом случае $U = \exp(-i\mathcal{H}t/\hbar)$. Тогда $\mathcal{H}' = \mathcal{H}^T$. Поэтому уравнение (5.3) наиболее удобно в случае стационарных симметричных гамильтонианов, ибо при этом операторы q_0 и q совпадают.

Иногда может оказаться удобнее работать не с оператором Q , а с какими-либо функциями от него, например $\varphi(Q)$, которые также являются интегралами движения. Тогда уравнения (5.8) заменяются, очевидно, следующей системой:

$$[\varphi(Q)](x) G(x, x_0, t) = [\varphi(q)]^T(x_0) G(x, x_0, t). \quad (5.12)$$

Аналогичным образом видоизменяется и уравнение (5.3). Можно переписать соотношение (5.12) в виде уравнения на собственные значения для интеграла по траекториям. Оно выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} [\varphi(Q)](x) \int_{x_0}^x \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x, x_0, t) \right] \mathcal{D}x(t) = \\ = [\varphi(q)]^T(x_0) \int_{x_0}^x \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(x, x_0, t) \right] \mathcal{D}x(t), \end{aligned} \quad (5.13)$$

и обобщает соотношения (5.4), (5.5) на случай произвольной функции от интегралов движения q_0 и p_0 .

Уравнения, аналогичные (5.8), могут быть написаны и в любом другом представлении. Все они получаются по следующему правилу. Пусть имеются $2N$ независимых операторов $d_j, j = 1, 2, \dots, 2N$, а функция Грина зависит от переменных y и y_0 . Пусть в начальный момент времени действие операторов d_j на первый аргумент функции Грина эквивалентно действию каких-то операторов $\varphi(d_j)$ на второй аргумент:

$$d(y) G(y, y_0, 0) = [\varphi(d)](y_0) G(y, y_0, 0). \quad (5.14)$$

Тогда, вводя интеграл движения $D = U dU^{-1}$, получим для функции Грина уравнение

$$D(\mathbf{y})G(\mathbf{y}, \mathbf{y}_0, t) = [\Phi(\mathbf{d})](\mathbf{y}_0)G(\mathbf{y}, \mathbf{y}_0, t). \quad (5.15)$$

В частности, в импульсном представлении снова получим уравнение (5.8), в котором нужно, очевидно, сделать замену $\mathbf{x} \rightleftharpoons \mathbf{p}$ и учесть, что в этом представлении $\mathbf{p}^T = \mathbf{p}$, а $\mathbf{x}^T = -\mathbf{x}$. Уравнения (5.9а) и (5.9б) справедливы и для функции $G(\mathbf{p}, \mathbf{x}_0, t)$ — амплитуды перехода из состояния $|\mathbf{x}_0\rangle$ в состояние $|\mathbf{p}\rangle$ за время t , нужно только заменить \mathbf{x} на \mathbf{p} .

Эти уравнения можно получить по указанной схеме, если учесть, что

$$G(\mathbf{p}, \mathbf{x}_0, 0) = (2\pi\hbar)^{-N/2} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}\mathbf{x}_0\right).$$

Рассмотрим еще одно встречающееся представление, а именно представление когерентных состояний [61, 63, 64], в котором каждому кет-вектору $|f\rangle$ ставится в соответствие целая аналитическая функция комплексного аргумента \mathbf{a} : $f(\mathbf{a}^*) = \exp(1/2 |\mathbf{a}|^2) \langle \mathbf{a} | f \rangle$ (звездочка означает комплексное сопряжение), где $\langle \mathbf{a} |$ — это эрмитово-сопряженный вектор к $|\mathbf{a}\rangle$ — собственному вектору неэрмитова оператора \mathbf{a} , удовлетворяющего следующим коммутационным соотношениям:

$$[a_j, a_k] = 0; \quad [a_j, a_k^\dagger] = \delta_{jk}; \quad a_j |\mathbf{a}\rangle = \alpha_j |\mathbf{a}\rangle, \quad (5.16)$$

где $\mathbf{a} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N)$ может быть произвольным комплексным вектором. Операторы \mathbf{a} и \mathbf{a}^\dagger действуют на функции $f(\mathbf{a}^*)$ по формулам

$$\mathbf{a}f(\mathbf{a}^*) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{a}^*} f(\mathbf{a}^*); \quad \mathbf{a}^\dagger f(\mathbf{a}^*) = \mathbf{a}^* f(\mathbf{a}^*), \quad (5.17)$$

а ядро единичного оператора в рассматриваемом представлении равно $G(\mathbf{a}^*, \beta, 0) = \exp(\mathbf{a}^* \beta)$:

$$f(\mathbf{a}^*) = \int \exp(\mathbf{a}^* \beta) f(\beta^*) d\mu(\beta); \quad d\mu(\beta) = \pi^{-N} \exp(-|\beta|^2) d(\operatorname{Re} \beta) d(\operatorname{Im} \beta). \quad (5.18)$$

Поэтому формула (5.14) в данном случае принимает следующий вид:

$$\mathbf{a}(\mathbf{a}) e^{\mathbf{a}^* \beta} = \beta e^{\mathbf{a}^* \beta} = \mathbf{a}^T(\beta) e^{\mathbf{a}^* \beta}; \quad \mathbf{a}^\dagger(\mathbf{a}) e^{\mathbf{a}^* \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} e^{\mathbf{a}^* \beta} = (\mathbf{a}^\dagger)^T(\beta) e^{\mathbf{a}^* \beta} \quad (5.19)$$

(на второй аргумент, очевидно, нужно действовать не операторами \mathbf{a} и \mathbf{a}^\dagger , а комплексно-сопряженными операторами $\mathbf{a}^* = (\mathbf{a}^\dagger)^T$ и $(\mathbf{a}^\dagger)^* = \mathbf{a}^T$). Следовательно, вводя интегралы движения $\mathbf{A} = U\mathbf{a}U^{-1}$ и $\mathbf{F} = U\mathbf{a}^\dagger U^{-1}$ (если гамильтониан неэрмитов, то, во-

обще говоря, $F \neq A^\dagger$, но соотношение $[A_j, F_k] = \delta_{jk}$ выполняется всегда), получим уравнения для функции Грина следующего вида:

$$A(\alpha) G(\alpha^*, \beta, t) = \beta G(\alpha^*, \beta, t); \quad (5.20a)$$

$$F(\alpha) G(\alpha^*, \beta, t) = \frac{\partial}{\partial \beta} G(\alpha^*, \beta, t). \quad (5.20b)$$

Физический смысл функции $G(\alpha^*, \beta, t)$ состоит в том, что величина $G(\alpha^*, \beta, t) \exp[-1/2(|\alpha|^2 + |\beta|^2)]$ есть амплитуда перехода из когерентного состояния $|\beta; 0\rangle$ в когерентное состояние $|\alpha; t\rangle$.

Преимуществом представления когерентных состояний является то, что в этом представлении функция Грина не имеет особенностей (функции $f(\alpha^*)$ — целые аналитические функции). Переход к координатному представлению осуществляется по формуле

$$G(x_2, x_1) = \int \langle x_2 | \alpha \rangle G(\alpha^*, \beta) \langle \beta | x_1 \rangle \exp \frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2) d\mu(\alpha) d\mu(\beta), \quad (5.21)$$

где $\langle x | \alpha \rangle$ — волновая функция в координатном представлении, соответствующая кет-вектору $|\alpha\rangle$.

В качестве примера рассмотрим, следуя [104], еще раз квантовую систему с гамильтонианом (эрмитовым или неэрмитовым), являющимся произвольной квадратичной формой от операторов q :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(t) &= 1/2 q B(t) q + C(t) q + \Phi(t); \\ q &= \begin{pmatrix} p \\ x \end{pmatrix}; \quad C = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}; \quad B = \begin{vmatrix} b_1 & b_2 \\ b_3 & b_4 \end{vmatrix}; \end{aligned} \quad (5.22)$$

N -мерные векторы c_1 и c_2 и N -мерные матрицы b_j , $j = 1, 2, 3, 4$, могут быть произвольными (достаточно гладкими) функциями времени. Очевидно, матрицу B можно всегда считать симметричной, т. е. $b_1 = \tilde{b}_1$, $b_4 = \tilde{b}_4$, $b_2 = \tilde{b}_3$, где тильда обозначает транспонированную матрицу. Если гамильтониан эрмитов, то матрица B и вектор C вещественны, но для дальнейшего это несущественно. Обсудим сначала классическую систему с квадратичным гамильтонианом (5.22), общей квадратичной формой координат x и импульсов p . Тогда уравнения Гамильтона — Якоби выглядят, если ввести $2N$ -мерный столбец $q = \begin{pmatrix} p \\ x \end{pmatrix}$, следующим образом (для произвольной классической системы):

$$\dot{q} = \Sigma \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}. \quad (5.23)$$

Здесь $\Sigma = \begin{vmatrix} 0 & -E_N \\ E_N & 0 \end{vmatrix}$ — матрица размером $2N \times 2N$, где E_N — единичная N -мерная матрица. Те же уравнения можно записать в координатах $\alpha = (x + ip)/\sqrt{2}$ и $\alpha^* = (x - ip)/\sqrt{2}$. Тогда, если ввести $2N$ -мерный вектор $\gamma = \begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^* \end{pmatrix}$, уравнения

Гамильтона — Якоби примут вид

$$\dot{\mathbf{y}} = \rho \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{y}}, \quad \text{где } \rho = \begin{vmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{vmatrix}. \quad (5.24)$$

Будем искать решение системы уравнений (5.23) в виде (траектория в фазовом пространстве)

$$\mathbf{q}(t) = \underline{\Lambda}(t) \mathbf{q}_0 + \underline{\Delta}(t); \quad \underline{\Lambda}(0) = E; \quad \underline{\Delta}(0) = 0. \quad (5.25)$$

Здесь \mathbf{q}_0 — начальные координаты точки в фазовом пространстве системы. Тогда, подставляя (5.25) в (5.23), получим уравнения для матрицы $\underline{\Lambda}(t)$ размером $2N \times 2N$ и $2N$ -мерный вектор $\underline{\Delta}(t)$. Они имеют вид

$$\dot{\underline{\Lambda}}(t) = \Sigma B \underline{\Lambda}(t); \quad \dot{\underline{\Delta}}(t) = \Sigma(B \underline{\Lambda} + C). \quad (5.26)$$

Решение уравнений (5.26) дает решение классических уравнений движения в фазовом пространстве системы с квадратичным гамильтонианом. Если разрешить соотношения (5.25) и выразить величины \mathbf{q}_0 через текущие координаты и время, мы получим функции

$$\mathbf{q}_0(t) = \Lambda(t) \mathbf{q} + \Delta; \quad \Lambda = \underline{\Lambda}^{-1}; \quad \Delta = -\underline{\Lambda} \underline{\Delta}, \quad (5.27)$$

являющиеся классическими интегралами движения. Из сохранения скобок Пуассона и действительности координат \mathbf{q} и \mathbf{q}_0 вытекает, что матрицы Λ и $\underline{\Lambda}$ принадлежат симплектической группе матриц $\text{Sp}(2N, R)$. Каноническим преобразованием в фазовом пространстве, а именно заменой переменных

$$\mathbf{q}' = u\mathbf{q} + \mu, \quad (5.28)$$

можно привести гамильтониан \mathcal{H} к виду без линейных по величинам \mathbf{q}' членов:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \mathbf{q}' B' \mathbf{q}' + \varphi(t); \quad B' = (\tilde{u}^{-1}) B u^{-1}. \quad (5.29)$$

Вернемся к рассмотрению квантового случая, т. е. будем считать величины \mathbf{q} в гамильтониане (5.22) операторами. Как и в классическом случае, интегралы движения \mathbf{p}_0 и \mathbf{q}_0 выражаются линейно через операторы \mathbf{p} и \mathbf{x} :

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{p}_0 \\ \mathbf{q}_0 \end{pmatrix} = \Lambda(t) \mathbf{q} + \Delta(t); \quad \Lambda = \begin{vmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 \\ \lambda_3 & \lambda_4 \end{vmatrix}; \quad \Delta = \begin{pmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \end{pmatrix}, \quad (5.30)$$

причем $2N$ -мерная матрица $\Lambda(t)$ и $2N$ -мерный вектор Δ являются решениями системы обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка

$$\dot{\Lambda} = \Lambda \Sigma B; \quad \Lambda(0) = E_{2N};$$

$$\dot{\Delta} = \Lambda \Sigma C; \quad \Delta(0) = 0; \quad -i\hbar \Sigma_{jk} = [q_j, q_k]; \quad (5.31)$$

E_N — единичная матрица размером $N \times N$. В общем случае матрица Λ комплексна, а операторы \mathbf{p}_0 и \mathbf{q}_0 неэрмитовы. Однако

если гамильтониан эрмитов, то эрмитовы и интегралы движений p_0 и q_0 , так как в этом случае Λ и Δ вещественны (операторы p и x при этом выбраны эрмитовыми).

Через интегралы движения гамильтониан выражается следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{1}{2} Q B' Q + C' Q + \Phi'; \quad B' = \tilde{\Lambda}^{-1} B \Lambda^{-1}; \quad C' = \tilde{\Lambda}^{-1} (C - B \Lambda^{-1} \Delta); \\ \Phi' &= \frac{1}{2} \Delta B' \Delta - C \Lambda^{-1} \Delta + \Phi. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Пусть операторы p и x совпадают с операторами импульса и координат. Поскольку коммутатор интегралов движения также является интегралом движения, то $[Q_j, Q_k] = [q_j, q_k] = -i\hbar \Sigma_{jk}$; $j, k = 1, 2, \dots, 2N$. Следовательно, матрица Λ является симплектической: $\Lambda \Sigma \tilde{\Lambda} = \Sigma$. Этот результат верен как в квантовой, так и в классической механике, ибо преобразование (5.30) является каноническим. Условие симплектичности означает, что $\det \Lambda = 1$, а N -мерные матрицы λ_k удовлетворяют условиям

$$\begin{aligned} \lambda_2 \tilde{\lambda}_1 &= \lambda_1 \tilde{\lambda}_2; & \lambda_4 \tilde{\lambda}_1 - \lambda_3 \tilde{\lambda}_2 &= E_N; \\ \lambda_3 \tilde{\lambda}_4 &= \lambda_4 \tilde{\lambda}_3; & \tilde{\lambda}_4 \lambda_1 - \tilde{\lambda}_2 \lambda_3 &= E_N; \\ \tilde{\lambda}_4 \lambda_2 &= \tilde{\lambda}_2 \lambda_4; & \Lambda^{-1} &= \begin{vmatrix} \tilde{\lambda}_4 & -\tilde{\lambda}_2 \\ -\tilde{\lambda}_3 & \tilde{\lambda}_1 \end{vmatrix}. \\ \tilde{\lambda}_1 \lambda_3 &= \tilde{\lambda}_3 \lambda_1; \end{aligned} \quad (5.33)$$

Для функции Грина получаем согласно (5.8) уравнения

$$\begin{aligned} \left(-i\hbar \lambda_3 \frac{\partial}{\partial x} + \lambda_4 x + \delta_2 \right) G(x, x_0, t) &= x_0 G; \\ \left(-i\hbar \lambda_1 \frac{\partial}{\partial x} + \lambda_2 x + \delta_1 \right) G(x, x_0, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} G(x, x_0, t). \end{aligned} \quad (5.34)$$

Пусть матрица λ_3 не вырождена. Тогда эти уравнения легко интегрируются и функция Грина имеет вид экспоненты от квадратичной формы:

$$\begin{aligned} G(x, x_0, t) &= \exp \left\{ \varphi(t) - \frac{i}{2\hbar} [x \lambda_3^{-1} \lambda_4 x - 2x \lambda_3^{-1} x_0 + \right. \\ &\quad \left. + x_0 \lambda_1 \lambda_3^{-1} x_0 + 2x \lambda_3^{-1} \delta_2 + 2x_0 (\delta_1 - \lambda_1 \lambda_3^{-1} \delta_2)] \right\}. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Заметим, что для совместности написанных уравнений необходимо, чтобы матрицы $\lambda_3^{-1} \lambda_4$ и $\lambda_1 \lambda_3^{-1}$ были симметричными. Но эта симметричность является, как легко проверить, следствием соотношений (5.33).

Для функции $\varphi(t)$ после подстановки в уравнение Шредингера получается следующее уравнение:

$$\dot{\varphi} = \frac{1}{2} \text{Sp} (\lambda_3^{-1} \lambda_4 b_1 - b_3) + \frac{i}{\hbar} c_1 \lambda_3^{-1} \delta_2 - \frac{i}{2\hbar} \delta_2 \tilde{\lambda}_3^{-1} b_1 \lambda_3^{-1} \delta_2 - \frac{i}{\hbar} \Phi.$$

Это уравнение легко интегрируется, если учесть следующие соотношения, вытекающие из уравнений (5.31): $\lambda_4 b_1 = -\dot{\lambda}_3 + \lambda_3 \dot{b}_3$,

$\delta_2 = \lambda_3 c_2 - \lambda_4 c_1$, а также тождество $\text{Sp } \lambda \lambda^{-1} = (d/dt) \ln \det \lambda(t)$. Константа интегрирования определяется требованием, что при $t \rightarrow +0$ $G \rightarrow \delta(x - x_0)$. Поэтому окончательное выражение для функции Грина следующее:

$$G(x, x_0, t) = (2\pi i \hbar)^{-N/2} [\det(-\lambda_3)]^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{i}{2\hbar} \left[x \lambda_3^{-1} \lambda_4 x - 2x \lambda_3^{-1} x_0 + x_0 \lambda_1 \lambda_3^{-1} x_0 + 2x \lambda_3^{-1} \delta_2 + 2x_0 (\delta_1 - \lambda_1 \lambda_3^{-1} \delta_2) + \delta_2 \lambda_1 \lambda_3^{-1} \delta_2 - 2 \int_0^t (\delta_1 \delta_2 - \Phi) dt \right] \right\}; \quad \det \lambda_3 \neq 0. \quad (5.36)$$

Оно совпадает с (4.8), если $t_2 = 0$, $x_2 = x$ и учтены естественные соотношения типа (5.33).

Канонические преобразования типа (5.30) и их приложения к некоторым физическим проблемам изучались также в работах [109, 110]. При этом для ядра преобразований были получены выражения, аналогичные (5.35), но с точностью до фазового множителя и с ограничением унитарными преобразованиями (т. е. в предположении, что матрица Λ вещественна).

Функции $G(p, p_0, t)$ и $G(p, x_0, t)$ вычисляются аналогичным образом. Чтобы из формулы (5.36) получить $G(p, p_0, t)$, следует сделать следующие подстановки: $x \rightarrow p$; $\lambda_3 \rightarrow \lambda_2$; $\lambda_4 \rightarrow \lambda_1$; $\delta_2 \rightarrow -\delta_1$; $i \rightarrow -i$, а чтобы получить $G(p, x_0, t)$, нужно заменить $x \rightarrow p$; $\lambda_3 \rightarrow \lambda_4$; $\lambda_1 \rightarrow \lambda_2$, кроме того, поменять знаки перед всеми членами, содержащими p , и убрать множитель $(-i)^{-N/2}$ перед экспонентой.

Если матрица λ_3 вырождается, но $\det \lambda_4 \neq 0$, то функцию $G(x, x_0, t)$ можно получить преобразованием Фурье из функции $G(p, x_0, t)$, так как последняя в этом случае особенностей не имеет. Поскольку матрица $\lambda_4^{-1} \lambda_3$ симметрична, то некоторым ортогональным преобразованием S (будем считать для простоты гамильтониан эрмитовым) ее можно привести к диагональному виду: $\lambda_4^{-1} \lambda_3 = S^{-1} \text{diag}(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k, 0, \dots, 0) S$ ($\mu_j \neq 0$, $j < k$). (5.37)

Следовательно, если при вычислении интеграла Фурье по p сделать подстановку $S p = y$, то интегралы по y_j , $j \leq k$, будут гауссовыми, а остальные $N - k$ интегралов дадут δ -функции. В результате вычислений получается следующее выражение для функции Грина в фокальных точках:

$$G(x, x_0, t) = (-2\pi i \hbar)^{-N/2} (\det \lambda_4)^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{i}{2\hbar} \left[x_0 \lambda_2 \lambda_4^{-1} x_0 + 2x_0 (\delta_1 - \lambda_2 \lambda_4^{-1} \delta_2) + \delta_2 \lambda_2 \lambda_4^{-1} \delta_2 - 2 \int_0^t (\delta_1 \delta_2 - \Phi) dt \right] \right\} \times \\ \times \prod_{j=1}^k \mu_j^{-1/2} \exp \left(-\frac{i}{2\hbar} \mu_j^{-1} z_j^2 \right) \prod_{j=k+1}^N \delta(z_j); \quad (5.38)$$

здесь $z = S(x - \lambda_4^{-1}x_0 + \lambda_4^{-1}\delta_2)$. Если $\det \lambda_4 = 0$, но $\det \lambda_2 \neq 0$ или $\det \lambda_1 \neq 0$, то выражения, аналогичные (5.38), можно получить, вычисляя преобразования Фурье от функций $G(p, p_0, t)$ или $G(x, p_0, t)$. Случай, когда все четыре λ -матрицы вырождаются одновременно, рассмотрен ниже.

Вычислим теперь функцию Грина в представлении когерентных состояний. Ограничимся при этом случае эрмитовых гамильтонианов (как видно из предыдущего, это не принципиальное ограничение, но в данном случае оно позволяет несколько упростить формулы, так как вместо четырех матриц типа $\lambda_j, j = 1, 2, 3, 4$, достаточно ввести только две). Произвольный квадратичный эрмитов гамильтониан можно представить в виде

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} [a^\dagger d_0 a + a d_0^* a^\dagger + a d_1 a + a^\dagger d_1^* a^\dagger] + f a + f^* a^\dagger, \quad (5.39)$$

причем N -мерная матрица d_1 симметрична, а матрица d_0 эрмитова. Интеграл движения $A = U a U^{-1}$ имеет вид

$$A = \xi(t) a + \eta(t) a^\dagger + \gamma, \quad (5.40)$$

где матрицы ξ и η и вектор γ являются решениями уравнений

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\xi} &= -\xi d_0 + \eta d_1; & \xi(0) &= E_N; \\ i\hbar \dot{\eta} &= -\xi d_1^* + \eta d_0^*; & \eta(0) &= 0; \\ i\hbar \dot{\gamma} &= -\xi f^* + \eta f; & \gamma(0) &= 0. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Поскольку коммутационные соотношения между операторами A и $F_k = U a_k^\dagger U^{-1}$ во времени не меняются и, кроме того, $F = A^\dagger$, то матрицы ξ и η удовлетворяют тождествам

$$\xi \xi^\dagger - \eta \eta^\dagger = E_N; \quad \tilde{\xi} \eta = \eta \tilde{\xi}; \quad \xi^\dagger \xi - \tilde{\eta} \eta^* = E_N; \quad \eta^\dagger \xi = \tilde{\xi} \eta^*. \quad (5.42)$$

Первое из этих тождеств означает, что для произвольного вектора z выполняется соотношение $(z, \xi \xi^\dagger z) = (z, z) + (\eta^\dagger z, \eta^\dagger z) \geq (z, z)$. Следовательно, матрица ξ является невырожденной (иначе нашелся бы ненулевой вектор z , для которого $\xi^\dagger z = 0$). Поэтому функция Грина в представлении когерентных состояний всегда имеет вид экспоненты от квадратичной формы, т. е. нигде не имеет особенностей. В этом одно из преимуществ представления когерентных состояний.

Решая уравнения (5.20) с учетом явного вида оператора A (5.40) и тождеств (5.42), получаем следующее выражение для функции Грина:

$$\begin{aligned} G(\alpha^*, \beta, t) &= (\det \xi)^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \alpha^* \xi^{-1} \eta \alpha^* + \alpha^* \xi^{-1} \beta + \frac{1}{2} \beta \eta^* \xi^{-1} \beta - \right. \\ &\quad \left. - \alpha^* \xi^{-1} \gamma + \beta (\gamma^* - \eta^* \xi^{-1} \gamma) + \frac{1}{2} \gamma \eta^* \xi^{-1} \gamma + \int_0^t \dot{\gamma} \gamma^* d\tau \right]. \quad (5.43) \end{aligned}$$

Функция Грина $G(\alpha^*, \beta, t)$ является производящей функцией для функции Грина $G(m, n, t) = G_{mn}(t)$ в фоковском представлении:

$$G(\alpha^*, \beta, t) = \sum_{n, m} \frac{(\alpha_1^*)^{m_1} \dots (\alpha_N^*)^{m_N} \beta_1^{n_1} \dots \beta_N^{n_N}}{(m_1! \dots m_N! n_1! \dots n_N!)^{1/2}} G(m, n, t). \quad (5.44)$$

Разлагая функцию Грина (5.43) в ряд по переменным α^* и β , получаем выражение для матричных элементов оператора эволюции U в дискретном фоковском базисе:

$$G_{mn}(t) = \frac{G(0, 0, t) H_M(\tilde{W}^{-1}S)}{(m_1! \dots m_N! n_1! \dots n_N!)^{1/2}}. \quad (5.45)$$

Здесь H_M — полином Эрмита $2N$ переменных; $M = (m_1, \dots, m_N, n_1, \dots, n_N)$;

$$W = \left\| \begin{array}{cc} \xi^* \eta^{-1} & -\xi^{-1} \\ -\tilde{\xi}^{-1} & -\eta^* \xi^{-1} \end{array} \right\|; \quad S = \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix},$$

где $s_1 = -\xi^{-1}\gamma$; $s_2 = \gamma^* - \eta^* \xi^{-1}\gamma$. Выражение (5.45) совпадает (если сделать соответствующие переобозначения) с амплитудой перехода при параметрическом возбуждении многомерного осциллятора (4.10). Это же выражение есть интеграл перекрытия волновой функции $|n; 0\rangle$ и волновой функции $|m; t\rangle$, получающейся в результате эволюции квадратичной системы с гамильтонианом (5.22) из состояния $|m; 0\rangle$. В представлении когерентных состояний волновая функция $\langle m | \beta; t \rangle$ (функция Грина в «косом» базисе) имеет вид

$$\langle m | \beta; t \rangle = G(0, \beta, t) H_m(W_1^{-1}\mu). \quad (5.46)$$

Здесь H_m — полином Эрмита от N переменных; $\mu = \xi^{-1}(\beta - \gamma)$; $W_1 = \xi^{-1}\eta$.

Теперь мы можем вычислить функцию Грина в координатном представлении в том случае, когда все λ -матрицы вырождены. Для этого введем операторы a и a^\dagger по формулам $\sqrt{2}a = x + ip$, $\sqrt{2}a^\dagger = x - ip$. Тогда матрицы ξ и η будут связаны с λ -матрицами согласно формулам

$$\begin{aligned} \xi &= 1/2(\lambda_q - i\lambda_p); & \eta &= 1/2(\lambda_q + i\lambda_p); & \gamma &= (2\hbar)^{-1/2} \delta; \\ \lambda_p &= \lambda_3 + i\lambda_1; & \lambda_q &= \lambda_4 + i\lambda_2; & \delta &= \delta_2 + i\delta_1. \end{aligned} \quad (5.47)$$

Нетрудно показать, используя тождества (5.33), что матрицы λ_p и λ_q не могут быть вырождены (мы рассматриваем сейчас для простоты случай эрмитовых гамильтонианов, в неэрмитовом случае формулы более громоздки). Функции $\langle x | \alpha \rangle$ в данном случае равны

$$\langle x | \alpha \rangle = (\pi\hbar)^{-N/4} \exp[-(2\hbar)^{-1}x^2 - 1/2\alpha^2 + (2/\hbar)^{1/2}\alpha x - 1/2|\alpha|^2]. \quad (5.48)$$

Поэтому, применяя преобразование (5.21), получим следующий результат:

$$G(x, x_0, t) = i^{N/2} (2\pi\hbar)^{-k/2} (\det \lambda_p)^{-1/2} \exp \left[-\frac{i}{2\hbar} x \lambda_p^{-1} \lambda_q x - \frac{t}{\hbar} x \lambda_p^{-1} \delta - \frac{1}{4\hbar} \delta^2 + \frac{1}{2\hbar} \int_0^t (\delta \delta^* - 2i\Phi) d\tau \right] \prod_{j=1}^k \mu_j^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{v_j^2}{2\hbar \mu_j} - \frac{1}{\hbar} v_j (S\delta)_j + \frac{1}{\hbar} [(Sx_0)_j]^2 \right\} \prod_{m=k+1}^N \delta(v_m) \exp \left\{ -\frac{1}{4\hbar} [(2Sx_0 - v)_m]^2 \right\}; \quad (5.49)$$

$$\lambda_3 \lambda_p^{-1} = S^{-1} \text{diag} (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k, 0, 0, \dots, 0) S; \quad \text{Re } \mu_j > 0, \quad j \leq k; \quad (5.50)$$

$$v = S(x_0 - \delta_2 - i\tilde{\lambda}_p^{-1}x). \quad (5.51)$$

В этих формулах S — вещественная ортогональная матрица, диагонализующая симметричную матрицу $\lambda_3 \lambda_p^{-1}$. Существование S очевидно в случае $\det \lambda_3 \neq 0$, ибо тогда, в силу определения (5.47), $\lambda_3 \lambda_p^{-1} = (E_N + i\tilde{\lambda}_3^{-1} \lambda_1)^{-1}$, а вещественная (в случае эрмитова гамильтониана) симметричная матрица $\lambda_3^{-1} \lambda_1$ диагонализуется вещественной ортогональной матрицей. Поскольку матрица $\lambda_3 \lambda_p^{-1}$ неособенная, то справедливость (5.50) можно доказать с помощью предельного перехода. Можно также показать, что в силу свойств λ -матриц аргументы δ -функций в (5.49) на самом деле всегда вещественны, если вещественны λ -матрицы.

Если гамильтониан от времени не зависит, то можно показать, что матрицы λ_j и векторы δ_i подчиняются, кроме условий (5.33), еще дополнительным соотношениям

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_1(-t) &= \lambda_4(t); & \tilde{\lambda}_{2,3}(-t) &= -\lambda_{2,3}(t); \\ \delta_I(t) &= \tilde{\lambda}_3^{-1} \delta_2(-t) - \lambda_3^{-1}(-t) \lambda_4(-t) \delta_2(t); \\ \delta_2(t) &= \lambda_4(t) \lambda_2^{-1}(t) \delta_I(t) + \tilde{\lambda}_2^{-1}(t) \delta_I(-t), \end{aligned} \quad (5.52)$$

так что в этом случае полученные для функций Грина выражения могут быть еще более упрощены.

Вычисляя преобразования Фурье от функций Грина $G(t)$, можно получить функции Грина стационарного уравнения Шредингера. Примеры точных функций Грина такого типа могут быть найдены, в частности, в работах [111—114].

В заключение этого параграфа сделаем тривиальное замечание, что поскольку известны функции Грина для квадратичных систем, то тем самым известны и функции Грина для целого семейства гамильтонианов, которые могут быть получены из (5.22) преобразованием типа $\mathcal{H}' = S\mathcal{H}S^{-1}$, где S — произвольный оператор. В частности, можно убрать каноническим преобразованием сдвига линейные члены в гамильтониане; это преобразование имеет вид

$$S = \exp(\mu(t)q); \quad i\dot{\mu}(t) - B(t)\rho\mu(t) + C(t) = 0; \quad (5.53)$$

$$\rho_{ij} = [q_i, q_j].$$

§ 6. Неквадратичная система — сингулярный нестационарный осциллятор

Данный параграф посвящен изучению неквадратичной квантовой системы — сингулярного квантового осциллятора, описываемого волновым уравнением [65, 66]

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \left(\frac{m\omega^2(t)}{2} x^2 + \frac{g}{x^2} \right) \Psi. \quad (6.1)$$

Но прежде чем изучать это уравнение, рассмотрим предельный случай — нестационарный осциллятор с переменной частотой, со стенкой в начале координат [114], решениями которого являются нечетные когерентные состояния $|\alpha_{\pm}\rangle$ (см. формулы (9.28) и (9.38) гл. I). Нужно только учесть, что скалярные произведения заданы в этой задаче интегрированием от точки $x = 0$ до бесконечности. С учетом новой нормировки приведем явный вид когерентных состояний $|\alpha_W\rangle$ для этой задачи:

$$|\alpha_W\rangle = \left(\frac{4m}{\pi\hbar\varepsilon^2} \right)^{1/4} \exp \left(\frac{im}{2\hbar} \frac{\varepsilon}{\varepsilon} x^2 + \frac{\varepsilon^*}{2\varepsilon} \alpha^2 - \frac{|\alpha|^2}{2} \right) \sin \left(\frac{x\alpha}{\varepsilon} \sqrt{\frac{2m}{\hbar}} \right). \quad (6.2)$$

Эти состояния не нормированы. Для нормировки их следует умножить на фактор $N_- (|\alpha|)$.

Выпишем также функции $|n_W\rangle$:

$$|n_W\rangle = \frac{(A^\dagger)^n}{\sqrt{(2n+1)!}} |0_W\rangle = \frac{(-1)^n}{\sqrt{(2n+1)!}} \left(\frac{4m}{\pi\hbar\varepsilon^2} \right)^{1/4} \left(\frac{\varepsilon^*}{2\varepsilon} \right)^{(2n+1)/2} \times \\ \times \exp \left(\frac{im}{2\hbar} \frac{\varepsilon}{\varepsilon} x^2 \right) H_{2n+1} \left(\frac{x}{|\varepsilon|} \sqrt{\frac{m}{\hbar}} \right), \quad (6.3)$$

где $H_n(x)$ — полиномы Эрмита. Следует учесть, что $|0_W\rangle$ — основное состояние осциллятора со стенкой — соответствует первому возбужденному состоянию обычного осциллятора.

Функция Грина для рассматриваемого осциллятора со стенкой легко получается из функции Грина для нестационарного осциллятора без стенки, определенной в [85], антисимметризацией:

$$G(x_2, t_2; x_1, t_1) = \sum_{n=0}^{\infty} |n_W, 2\rangle \langle n_W, 1| = i \left(\frac{2m}{i\pi\hbar\rho_1\rho_2 \sin \gamma} \right)^{1/2} \times \\ \times \sin \left(\frac{m x_1 x_2}{\hbar\rho_1\rho_2 \sin \gamma} \right) \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \left[\frac{\dot{\rho}_2}{\rho_2} x_2^2 - \frac{\dot{\rho}_1}{\rho_1} x_1^2 + \text{ctg } \gamma \left(\frac{x_2^2}{\rho_2^2} + \frac{x_1^2}{\rho_1^2} \right) \right] \right\}, \quad (6.4)$$

где

$$\rho_k = |\varepsilon(t_k)|; \quad \gamma = \int_{t_1}^{t_2} \frac{d\tau}{\rho^2(\tau)}.$$

Эту же функцию можно получить интегрированием по когерентным состояниям: $G(2, 1) = \pi^{-1} \int d^2\alpha | \alpha_W, 2 \rangle \langle \alpha_W, 1 |$.

Перейдем к рассмотрению уравнения (6.1) при произвольных значениях параметра g . Мы будем пока рассматривать это уравнение на полуоси $0 < x < \infty$. Удобно ввести параметр $a = \frac{1}{2} (1 + 8mg/\hbar^2)^{1/2}$, поскольку во все формулы g входит именно в такой комбинации. Будем считать, что $g > -\hbar^2/8m$, т. е. что a — вещественное и положительное число. Случай, когда $g < -\hbar^2/8m$ (обычно его называют «падением частицы на центр»), рассматривается отдельно.

Решения уравнения (6.1) для произвольной функции $\omega(t)$ получены в работе [115]. Они могут быть выражены через функцию $\varepsilon(t)$, определенную соотношениями (1.3) и (1.5) гл. II, следующим образом:

$$\Psi_n(x, t) = \left[2 \left(\frac{m}{\hbar \varepsilon^2} \right)^{a+1} \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+a+1)} \right]^{1/2} x^{a+1/2} \times \\ \times \exp \left(-2in\gamma + \frac{im}{2\hbar} \frac{\dot{\varepsilon}}{\varepsilon} x^2 \right) L_n^a \left(\frac{m\dot{\gamma}}{\hbar} x^2 \right), \quad (6.5)$$

где $L_n^a(x)$ — полином Лагерра, $\gamma(t)$ — аргумент комплексного числа ε : $\varepsilon(t) = \rho(t) \exp(i\gamma(t))$, ρ и γ — вещественные функции, причем, в силу (1.4) гл. II, $\rho^2(t) \dot{\gamma} = 1$. Полезно также иметь в виду соотношение $\dot{\varepsilon}/\varepsilon = \dot{\rho}/\rho + i\dot{\gamma}$. Функции (6.5) ортонормированы:

$$\int_0^\infty \Psi_m^*(x, t) \Psi_n(x, t) dx = \delta_{nm}, \quad \text{и образуют полную систему}$$

на интервале $0 < x < \infty$ в классе функций, интегрируемых с квадратом модуля [116]. Если $0 < a < 1$, то существует вторая система квадратично интегрируемых решений, получающихся из (6.5) заменой a на $-a$. Однако, как показано в [117], эти решения следует отбросить по физическим соображениям. Подробнее этот вопрос мы обсудим ниже, а пока вторую систему решений рассматривать не будем.

Если частота осциллятора от времени не зависит, то, полагая в (6.5) $\varepsilon(t) = \omega^{-1/2} \exp(i\omega t)$, получим стационарные состояния с собственными значениями энергии $E_n = \hbar\omega(2n + a + 1)$.

При $g = 0$ ($a = 1/2$) волновые функции (6.5) совпадают с решениями (6.3) для осциллятора со стенкой в силу тождества [88] $H_{2n+1}(x) = (-1)^n 2^{2n+1} n! x L_n^{1/2}(x^2)$.

Если a — целое или полуцелое число, то, как будет показано ниже, решения (6.5) тесно связаны с радиальными волновыми функциями для n -мерного нестационарного изотропного осциллятора.

Рассмотрим интегралы движения, т. е. операторы, коммутирующие на решениях уравнения Шредингера с оператором $i\hbar \partial/\partial t - \mathcal{H}$. Как показано в [115], одним из интегралов является оператор

$$A = (2m\hbar)^{-1} [(\varepsilon p_x - \dot{\varepsilon} m x)^2 + 2\varepsilon^2 m g/x^2] = a^2 + \varepsilon^2 g/\hbar x^2, \quad (6.6)$$

где a — линейный интеграл движения (см. (1.2) гл. II) для нестационарного несингулярного осциллятора. Оператор A неэрмитов.

Очевидно, что эрмитов оператор $B = [A, A^\dagger]/4$ также является интегралом движения:

$$B = \hbar^{-1} [\rho^2(t) (p_x^2/2m + g/x^2) + (\dot{\rho}^2 + \dot{\gamma}) mx^2/2 - \rho\dot{\rho} (xp_x + p_x x)/2]. \quad (6.7)$$

Операторы A, A^\dagger и B удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$[A, A^\dagger] = 4B; \quad [B, A^\dagger] = 2A^\dagger; \quad [B, A] = -2A. \quad (6.8)$$

В частном случае, когда $\omega(t) = \text{const}$,

$$A = \exp(2i\omega t) [(p_x - im\omega x)^2 + 2mg/x^2]; \quad (6.9)$$

$$B = \mathcal{H}/\hbar\omega.$$

Таким образом, B является интегралом движения, совпадающим (с точностью до множителя) в стационарном случае с гамильтонианом. Отсюда сразу можно сделать вывод, что решения (6.5) (далее будем обозначать их символом $|n\rangle$) — это собственные функции оператора B с собственными значениями $2n + a + 1$. Используя коммутационные соотношения (6.8) и ортогональность функций (6.5), можно показать, что имеют место соотношения

$$A |n\rangle = \mu_n |n-1\rangle; \quad A^\dagger |n\rangle = \mu_{n+1} |n+1\rangle; \quad (6.10)$$

$$\mu_n = 2 [n(a+n)]^{1/2};$$

$$|n\rangle = (A^\dagger)^n \lambda_n |0\rangle; \quad \lambda_n = (\mu_1 \mu_2 \dots \mu_n)^{-1} = \left[\frac{\Gamma(a+1)}{2^{2n} n! \Gamma(a+n+1)} \right]^{1/2}. \quad (6.11)$$

Эти формулы можно непосредственно проверить с помощью явных выражений (6.5) для $|n\rangle$, учитывая при этом различные соотношения для полиномов Лагерра [88].

Используя производящую функцию для полиномов Лагерра [88] $\sum_{n=0}^{\infty} L_n^a(x) z^n = (1-z)^{-(a+1)} \exp[xz/(z-1)]$, можно построить производящую функцию для собственных векторов оператора B [115]:

$$G(z, x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{\Gamma(a+n+1)}{\Gamma(n+1)} \right]^{1/2} \Psi_n^*(x, t) z^n =$$

$$= \left[2 \left(\frac{m}{\hbar \varepsilon^2} \right)^{a+1} \right]^{1/2} x^{a+1/2} (1-s)^{-(a+1)} \exp \left(\frac{im}{2\hbar} \frac{\dot{\varepsilon}}{\varepsilon} x^2 + \frac{m}{\hbar} \dot{\gamma} x^2 \frac{s}{s-1} \right);$$

$$s = ze^{-2i\gamma}; \quad |z| < 1; \quad (6.12)$$

формально ее можно представить в виде

$$G(z, x, t) = [\Gamma(a+1)]^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} (n! 2^n)^{-1} (zA^\dagger)^n |0\rangle = \\ = [\Gamma(a+1)]^{1/2} \exp\left(\frac{zA^\dagger}{2}\right) |0\rangle.$$

Можно построить и другую производящую функцию, являющуюся в какой-то мере аналогом нечетных когерентных состояний для осциллятора, о которых говорилось в § 9 гл. I.

Легко проверить, что функция $|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha^{2n} \lambda_n |n\rangle$ является собственной функцией оператора A :

$$A|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n}}{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_n} A|n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^{2n}}{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_{n-1}} |n-1\rangle = \alpha^2 |\alpha\rangle. \quad (6.13)$$

Нормированные собственные функции оператора A имеют вид

$$|\alpha\rangle = [\Gamma(a+1)]^{-1/2} N(|\alpha|) \sum_{n=0}^{\infty} \alpha^{2n} \lambda_n |n\rangle = N(|\alpha|) \left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right)^{-a} \left(\frac{2m\alpha}{\hbar \varepsilon^2}\right)^{1/2} \times \\ \times \exp\left(\frac{im}{2\hbar} \frac{\varepsilon}{\varepsilon} x^2 + \frac{\alpha^2}{2} \frac{\varepsilon^*}{\varepsilon}\right) J_a\left(\frac{x\alpha}{\varepsilon} \sqrt{\frac{2m}{\hbar}}\right); \quad (6.14) \\ N(|\alpha|) = [J_a(|\alpha|^2) |\alpha^2/2|^{-a}]^{-1/2}.$$

Здесь $J_a(x)$ — функция Бесселя порядка a , $I_a(x)$ — модифицированная функция Бесселя [88]. Формула (6.14) следует из производящей функции для полиномов Лагерра [88]:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{L_n^a(x) z^n}{\Gamma(n+a+1)} = (xz)^{-a/2} e^z J_a(2\sqrt{xz}).$$

Если $a = 1/2$, то функции (6.14) совпадают с точностью до множителя $|\alpha|/\alpha$ с нечетными когерентными состояниями для осциллятора со стенкой (6.2), так как $J_{1/2}(x) = (2/\pi x)^{1/2} \sin x$.

При вычислении скалярных произведений векторов $|\alpha\rangle$ используется интеграл [88]

$$\int_0^{\infty} J_a(\alpha t) J_a(\beta t) e^{-\gamma t^2} dt = (2\gamma)^{-1} \exp\left(-\frac{\alpha^2 + \beta^2}{4\gamma}\right) I_a\left(\frac{\alpha\beta}{2\gamma}\right). \quad (6.15)$$

Легко видеть, что состояния $|\alpha\rangle$ не ортогональны друг к другу:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = N(|\alpha|) N(|\beta|) (\alpha^* \beta/2)^{-a} I_a(\alpha^* \beta), \quad (6.16)$$

Поскольку оператор A неэрмитов, то в спектр его собственных значений входят все комплексные числа, тогда как оператор

A^\dagger вовсе не имеет собственных функций. Последнее утверждение может быть доказано с помощью соотношений (6.10) точно так же, как и для оператора a^\dagger в случае обычного осциллятора.

Не представляет труда вычислить средние значения оператора B (т. е. в стационарном случае среднюю энергию) как в состояниях (6.12) (обозначим их символом $|z\rangle$), так и в состояниях $|\alpha\rangle$ (6.14).

В первом случае используем соотношение

$$\sum_{n=0}^{\infty} \binom{n+a}{n} x^n = (1-x)^{-(a+1)}; \quad \binom{n+a}{n} = \frac{\Gamma(n+a+1)}{\Gamma(n+1)\Gamma(a+1)}. \quad (6.17)$$

Тогда

$$\langle B \rangle = \frac{\langle z|B|z\rangle}{\langle z|z\rangle} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n+1)}{\Gamma(n+1)} \frac{2n+a+1}{\langle z|z\rangle} |z|^{2n} = (a+1) \frac{1+|z|^2}{1-|z|^2}. \quad (6.18)$$

Во втором случае, используя определение функций Бесселя, получим

$$\langle \alpha|B|\alpha\rangle = N^2 (|\alpha|) \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{|\alpha|^2}{2}\right)^{2n} \frac{2n+a+1}{n! \Gamma(n+a+1)} = 1 + |\alpha|^2 \frac{J'_a(|\alpha|^2)}{J_a(|\alpha|^2)} \quad (6.19)$$

В частности, для осциллятора со стенкой (при $a = 1/2$)

$$\langle \alpha_W|B|\alpha_W\rangle = 1/2 + |\alpha|^2 \operatorname{cth}(|\alpha|^2). \quad (6.20)$$

Рассмотрим теперь функцию Грина уравнения (6.1), которую можно вычислить по формуле $G(2, 1) = \sum_{n=0}^{\infty} |n, 2\rangle \langle n, 1|$, используя одну из производящих функций для полиномов Лагерра [88]:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{\Gamma(n+a+1)} L_n^a(x) L_n^a(y) z^n &= \\ &= \frac{1}{1-z} \exp\left(-z \frac{x+y}{1-z}\right) (xyz)^{-a/2} J_a\left(2 \sqrt{\frac{xyz}{1-z}}\right). \end{aligned}$$

После проведения вычислений получаем

$$\begin{aligned} G(x_2, t_2; x_1, t_1) &= (\hbar \rho_1 \rho_2 \sin \gamma)^{-1} m (x_1 x_2)^{1/2} \exp \left\{ \left[-i(a+1) \frac{\pi}{2} \right] + \right. \\ &+ \left. \frac{im}{2\hbar} \left[\frac{\dot{p}_2}{\rho_2} x_2^2 - \frac{\dot{p}_1}{\rho_1} x_1^2 + \operatorname{ctg} \gamma \left(\frac{x_2^2}{\rho_2^2} + \frac{x_1^2}{\rho_1^2} \right) \right] \right\} J_a \left(\frac{m x_1 x_2}{\hbar \rho_1 \rho_2 \sin \gamma} \right). \quad (6.21) \end{aligned}$$

Обозначения здесь те же, что и в (6.4). В частности, при $a = 1/2$ получим функцию Грина (6.4) для осциллятора со стенкой. Рассмотрим два частных случая формулы (6.21):

1) $\omega = \text{const}$. Тогда $\rho = \omega^{-1/2}$; $\rho = 0$; $\gamma = \omega(t_2 - t_1) = \omega T$;

$$G(2, 1) = \frac{m\omega(x_1 x_2)^{1/2}}{\hbar \sin \omega T} J_a \left(\frac{m\omega x_1 x_2}{\hbar \sin \omega T} \right) \exp \left[\frac{i m \omega}{2 \hbar \text{tg } \omega T} (x_1^2 + x_2^2) \right]. \quad (6.22)$$

Отметим, что в этом случае функция Грина была получена методом, близким к фейнмановскому интегрированию по путям, в работе [118].

2) $\omega = 0$. Результат можно получить либо переходя к пределу $\omega \rightarrow 0$ в (6.22), либо полагая $\varepsilon(t) = 1 + it$ в (6.21):

$$G(2, 1) = m(x_1 x_2)^{1/2} (\hbar T)^{-1} J_a \left(\frac{m x_1 x_2}{\hbar T} \right) \exp \left[\frac{i m}{2 \hbar T} (x_1^2 + x_2^2) - i \frac{(a+1)\pi}{2} \right]. \quad (6.23)$$

Рассмотрим амплитуды и вероятности переходов между энергетическими уровнями. Пусть $\omega(t) = \omega_{\text{in}} = \text{const}$ при $t \rightarrow -\infty$ и $\omega = \omega_f = \text{const}$ при $t \rightarrow +\infty$. При $t \rightarrow -\infty$ имеются стационарные состояния, определяемые формулой (6.5) с $\varepsilon = \omega_{\text{in}}^{-1/2} \exp(i\omega_{\text{in}} t)$; обозначим их через $|n, \text{in}\rangle$. Стационарные состояния при $t \rightarrow \infty$ с $\varepsilon(t) = \omega_f^{-1/2} \exp(i\omega_f t)$ обозначим через $|n, \text{f}\rangle$. Через $|n, t\rangle$ обозначим решения уравнения Шредингера, совпадающие при $t \rightarrow -\infty$ с $|n, \text{in}\rangle$. Дальнейшая эволюция этих состояний определяется в конечном счете эволюцией функции $\varepsilon(t)$. Амплитуда перехода из состояния $|n, \text{in}\rangle$ в состояние $|m, \text{f}\rangle$ равна $T_n^m = \langle m, \text{f} | n, t \rightarrow \infty \rangle$. При вычислении этого интеграла полиномы Лагерра были выражены через вырожденную гипергеометрическую функцию [88], а затем использовалась формула (f, 10) из [88]. Получающаяся в результате гипергеометрическая функция в данном случае сводится к полиному Якоби [88], и окончательный результат таков:

$$\begin{aligned} T_n^m &= \left[\frac{n!}{m!} \frac{\Gamma(m+a+1)}{\Gamma(n+a+1)} \right]^{1/2} \eta^{m-n} \xi^{*n} \xi^{-(m+a+1)} P_n^{(m-n, a)} \left(1 - 2 \left| \frac{\eta}{\xi} \right|^2 \right) = \\ &= \left[\frac{m!}{n!} \frac{\Gamma(n+a+1)}{\Gamma(m+a+1)} \right]^{1/2} (-\eta^*)^{n-m} \xi^{*m} \xi^{-(n+a+1)} P_m^{(n-m, a)} \left(1 - 2 \left| \frac{\eta}{\xi} \right|^2 \right). \end{aligned} \quad (6.24)$$

Здесь ξ и η — постоянные комплексные числа, определяющие поведение функции $\varepsilon(t)$ при $t \rightarrow \infty$:

$$\varepsilon(t \rightarrow \infty) = \omega_f^{-1/2} (\xi e^{i\omega_f t} - \eta e^{-i\omega_f t}). \quad (6.25)$$

На ξ и η наложено одно ограничение, вытекающее из коммутационных соотношений: $|\xi|^2 - |\eta|^2 = 1$. Матричный элемент (6.24) выражается через интеграл, вычислявшийся выше при получении амплитуды перехода между уровнями Ландау в переменном магнитном поле. Параметр a в этом случае целый, но, поскольку выражение матричного элемента аналитично по этому параметру, естественно, что ответ получается в обоих случаях одинаковым.

Вероятности перехода при $m \geq n$ равны

$$W_n^m = |T_n^m|^2 = \frac{n!}{m!} \frac{\Gamma(a+m+1)}{\Gamma(a+n+1)} R^{m-n} (1-R)^{a+1} |P_n^{(m-n, a)}(1-2R)|^2; \quad R = \left| \frac{\eta}{\xi} \right|^2. \quad (6.26)$$

Если $m < n$, то в правой части нужно поменять местами m и n . Таким образом, вероятности перехода выражаются через единственный параметр R , который можно рассматривать как коэффициент отражения от некоторого потенциального барьера. Отметим симметрию формулы для вероятности перехода $W_n^m = W_m^n$.

Как частный случай приведем формулы, описывающие возбуждение основного состояния:

$$T_0^m = \left[\binom{m+a}{m} \right]^{1/2} \eta^m \xi^{-(m+a+1)}; \quad (6.27)$$

$$W_0^m = \binom{m+a}{m} R^m (1-R)^{a+1}. \quad (6.28)$$

Легко проверить, используя формулу (6.28), что $\sum_{0=m}^{\infty} W_0^m = 1$.

Производящую функцию для амплитуд перехода можно получить, вычислив интеграл $\int_0^{\infty} G^*(u, x; f) G(z, x; t) dx$. В результате получим

$$\sum_{n, m=0}^{\infty} \left[\binom{a+m}{a} \binom{a+n}{a} \right]^{1/2} T_n^m x^n y^m = (\xi + \eta^* x - \eta y - \xi^* xy)^{-(a+1)}. \quad (6.29)$$

Вторую производящую функцию получим, вычисляя амплитуды переходов между состояниями $|\alpha, \text{in}\rangle$ и $|\alpha, \text{f}\rangle$. Ее можно представить в таком виде (при вычислениях используется формула (6.15)):

$$\sum_{n, m=0}^{\infty} \frac{T_n^m z_1^{2n} z_2^{2m}}{[n! m! \Gamma(a+n+1) \Gamma(a+m+1)]^{1/2}} = \xi^{-1} (z_1 z_2)^{-a} \exp\left(\frac{z_2^2 \eta - z_1^2 \eta^*}{\xi}\right) I_a\left(\frac{2z_1 z_2}{\xi}\right). \quad (6.30)$$

Поскольку амплитуды переходов выражаются через полиномы Якоби, то из формул (6.29) и (6.30) можно получить производящие функции для этих полиномов [44, 119].

Рассмотрим предельные случаи полученных точных формул для вероятностей переходов. Одним из них является случай медленного (адиабатического) изменения частоты. Точнее говоря,

рассмотрим такой вид зависимости ω от времени, когда $|\dot{\omega}/\omega^2| \ll 1$. Тогда и $R \ll 1$, и можно разложить точную формулу (6.26) в ряд по степеням R , ограничиваясь старшими членами:

$$W_n^m = \frac{m!}{n!} \frac{\Gamma(n+a+1)}{\Gamma(m+a+1)} \frac{R^{|m-n|}}{(|m-n|!)^2} \times \\ \times \left[1 - \frac{2nm + (a+1)(n+m+1)}{m-n+1} R + \dots \right], \quad m \geq n; \quad (6.31)$$

$$W_n^n = 1 - [2n^2 + (a+1)(2n+1)] R + \dots$$

Как видно из этих соотношений, ограничиться старшими членами в разложении по степеням R можно лишь для относительно небольших квантовых чисел, когда выполняются условия $Rnm \ll 1$ и $Rna \ll 1$.

Другим предельным случаем, в каком-то смысле противоположным первому, является квазиклассический, когда квантовые числа n и m велики. Используя асимптотику полиномов Якоби [88] и формулу Стирлинга для гамма-функции, получим

$$W_n^m \approx \frac{\theta/2}{\text{tg}(\theta/2)} |J_{|n-m|}(N\theta)|^2. \quad (6.32)$$

Здесь $R = \sin^2(\theta/2)$; $N = 1/2(n+m+a+1)$. Эта формула справедлива, когда $n \rightarrow \infty$, $m \rightarrow \infty$, а $|n-m| = \text{const}$. Если $N\theta \gg 1$, то можно воспользоваться асимптотикой функций Бесселя и написать

$$W_n^m \approx \frac{1}{\pi N} \text{ctg} \frac{\theta}{2} \cos^2 \left(N\theta - \frac{|n-m|}{2} \pi - \frac{\pi}{4} \right). \quad (6.33)$$

Рассмотрим также приближенную формулу, описывающую возбуждение очень высоких уровней. Используя формулу [88]

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \alpha^{-n} P_n^{(\alpha, \beta)}(x) = \frac{1}{n!} \left(\frac{x+1}{2} \right)^n, \quad (6.34)$$

получим, ограничиваясь главным членом,

$$W_n^m \approx \frac{m^{a+2n}}{n! \Gamma(a+n+1)} R^{m-n} (1-R)^{2n+a+1} \left[1 + O\left(\frac{1}{m}\right) \right]; \quad m \rightarrow \infty. \quad (6.35)$$

Аналогично можно получить приближенную формулу для случая $a \rightarrow \infty$, $m > n$ (если a — целое или полуцелое число, то эта формула приближенно описывает переходы между энергетическими уровнями n -мерного изотропного осциллятора в состоянии с очень большим моментом):

$$W_n^m \approx \frac{\Gamma(m+a+1)}{\Gamma(n+a+1)} \frac{a^{2n}}{n! m!} R^{m+n} (1-R)^{a+1}. \quad (6.36)$$

Если $n = 0$, то эта формула совпадает с точной (6.28). Однако при очень малых R она неверна (при $R = 0$ получим $W_n^m = 0$, если

$n + m \neq 0$). Таким образом, формулу (6.36) следует применять, если $aR \gtrsim 1$.

Обобщим полученные результаты на случай многомерного изотропного осциллятора [65].

Рассмотрим систему с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{p+2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{m\omega^2(t)}{2} r^2 + \frac{K}{r^2}; \quad r^2 = \sum_{i=1}^{p+2} x_i^2. \quad (6.37)$$

Если $p = 1$, то это — пространственный изотропный осциллятор. Гамильтониан (6.37) инвариантен относительно группы вращений в $(p + 2)$ -мерном пространстве, поэтому решения уравнения Шредингера для него могут быть выбраны в виде $\Psi(x) = R(r) Y(\theta_1, \theta_2, \dots)$, где $Y(\theta_1, \theta_2, \dots)$ — известные функции (сферические гармоники [88]), являющиеся обобщением сферических функций $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ для обычного трехмерного пространства. Уравнение для радиальной волновой функции при этом имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial R}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{p+1}{r} \frac{\partial R}{\partial r} - \frac{l(l+1)R}{r^2} \right) + \left(\frac{m\omega^2 r^2}{2} + \frac{K}{r^2} \right) R, \quad (6.38)$$

где l — целое число, и является обобщением абсолютного значения момента в трехмерном случае. Поскольку в (6.38) входит лишь l , а другие угловые квантовые числа не входят, то каждый уровень энергии вырожден $(2l + p)(l + p - 1)!/l!p!$ раз. Обозначив $R = r^{-(p+1)/2} \chi(r)$, мы получим для $\chi(r)$ одномерное уравнение Шредингера (6.1), в котором нужно положить $g = K + (\hbar^2/2m)[l(l + p) + (p^2 - 1)/4]$. Таким образом, все ранее полученные результаты переносятся и на случай многомерного осциллятора. В частности, функция Грина может быть представлена в виде ряда

$$G(2, 1) = \sum_{l, m, \dots} G_l(r_2, t_2; r_1, t_1) Y_{l, m, \dots}^*(\theta'_1, \theta'_2, \dots) Y_{l, m, \dots}(\theta_1, \theta_2, \dots), \quad (6.39)$$

где G_l — это вычисленная по формуле (6.21) функция Грина для заданного квантового числа l . В случае $K = 0$ ряд (6.39) вычисляется и дает квадратичную экспоненту [72].

Задача о движении заряженной (для простоты бесспиновой) частицы в однородном магнитном поле с вектор-потенциалом $[\mathbf{H}(t) \times \mathbf{r}/2]$ и в электрическом поле с потенциалом $K/(x^2 + y^2)$ также сводится к уже разобранный нами, поскольку уравнение (в цилиндрических координатах) для радиальной части волновой функции совпадает в этом случае с (6.38) при $p = 0$.

Приведем для этого случая явные формулы. Так, состояние $|n, l, p_z\rangle$ с главным квантовым числом n , проекцией момента l

и импульсом вдоль поля p_z имеет вид

$$|n, l, p_z\rangle = (2\pi r)^{-1/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(p_z z - \frac{p_z^2 t}{2m} + \hbar l \varphi - \frac{\hbar l}{2} \int_0^t \omega(\tau) d\tau \right) \right] \Psi_n(r, t); \quad (6.40)$$

$$r^2 = x^2 + y^2; \quad a = (l^2 + 2mK/\hbar^2)^{1/2}; \quad \omega(t) = eH(t)/mc.$$

При $K = 0$ эта функция переходит в полученную в [72]. Функция Грина $G(2, 1)$ данной задачи может быть представлена в виде (частный случай формулы (6.39))

$$G(r_2, \varphi_2, t_2; r_1, \varphi_1, t_1) = \sum_{l=0}^{\infty} G_l(r_2, t_2; r_1, t_1) \cos \left[l(\varphi_2 - \varphi_1) + \frac{l}{2} \int_{t_1}^{t_2} \omega(\tau) d\tau \right]. \quad (6.41)$$

Амплитуды перехода между уровнями энергии $T_{n_i l_i}^{n_2 l_2}$ имеют следующий вид:

$$T_{n_i l_i}^{n_2 l_2} = \delta_{l_i l_2} T_{n_i}^{n_2}(\xi, \eta, a); \quad a = (l^2 + 2mK/\hbar^2)^{1/2}. \quad (6.42)$$

При $K = 0$ эта формула переходит в полученную в [72].

Рассмотрим теперь многомерный осциллятор с $K = 0$. В этом случае мы знаем $p + 2$ линейных интеграла движения a_i , определяемых по формуле (1.2) гл. II. В то же время, как мы только что выяснили, задачу можно свести к одномерной с $g = \hbar^2 [l(l + p) + (p^2 - 1)/4]/2m$, если рассматривать состояния с заданным моментом, а для одномерной задачи мы знаем интеграл движения A (6.6). Рассмотрим интеграл движения

$$a^2 = \sum_{i=1}^{p+2} a_i^2 = (2m\hbar)^{-1} \left[\sum_{i=1}^{p+2} p_i^2 \varepsilon^2 + \varepsilon^2 m^2 r^2 - \varepsilon \sum_{i=1}^{p+2} (x_i p_i + p_i x_i) \right]. \quad (6.43)$$

Если его рассматривать только для функций $R(r) Y_{l, m, \dots}(\theta_1, \theta_2, \dots)$, то он может быть представлен в виде

$$a^2 = (2m\hbar)^{-1} \left[-\hbar^2 \varepsilon^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{p+1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+p)}{r^2} \right) + \varepsilon^2 m^2 r^2 + i\hbar \varepsilon \left(2r \frac{\partial}{\partial r} + p + 1 \right) \right]. \quad (6.44)$$

Далее мы из многомерного гамильтониана (6.37) \mathcal{H}_p получаем одномерный гамильтониан \mathcal{H}_1 с помощью подстановки $R = r^{-(p+1)/2} \times \chi(r)$. При этом $\mathcal{H}_p(r^{-(p+1)/2} \chi) = r^{-(p+1)/2} \mathcal{H}_1 \chi$. Аналогично, вместо оператора a^2 мы должны ввести оператор \tilde{a}^2 , определяемый соотношением $a^2 r^{-(p+1)/2} \chi = r^{-(p+1)/2} \tilde{a}^2 \chi$. Легко проверить, что определенный таким образом оператор \tilde{a}^2 совпадает с интегралом A (6.6), в котором следует положить $g = [l(l + p) + (p^2 - 1)/4]\hbar^2/2m$. При этом параметр a равен $l + p/2$, т. е. многомерный осциллятор

описывается полученными ранее формулами, в которых a — целое или полуцелое число.

До сих пор мы рассматривали решения уравнения (6.1) лишь на полуоси $0 < x < \infty$. В случае потенциала отталкивания $g > 0$ это вполне оправдано, так как, согласно классическому рассмотрению, частица с конечной энергией не может достичь начала координат и тем более перескочить на другую полуось. Если же в окрестности начала координат потенциал имеет притягивающий характер, то с классической точки зрения вполне можно вести рассмотрение на всей оси; в этом случае частица пройдет начало координат с бесконечной скоростью и перескочит на другую полуось. От бесконечной скорости в начале координат можно избавиться, обрезав потенциал снизу. Таким образом, можно поставить вопрос о распространении полученных ранее решений на всю ось. Мы уже отмечали, что при $0 < a < 1/2$, кроме решений (6.5), существуют и другие решения, отличающиеся от (6.5) лишь знаком при коэффициенте a (факт, отмеченный и в работе [117]), образующие полную систему [116] и обращающиеся в нуль при $x = 0$. Единственное, чем эти решения хуже решений (6.5), — это то, что величина $\Psi(x)\Psi'(x) = \infty$ при $x = 0$. Мы уже отмечали, что решения (6.5) (будем их обозначать $|n, -\rangle$) при $a = 1/2$ совпадают с нечетными состояниями осциллятора. Легко видеть, что решения второго типа (обозначим их $|n, +\rangle$) переходят в четные волновые функции осциллятора при $a = 1/2$. Если считать, что решения на всей оси должны переходить в решения для осциллятора при $a = 1/2$, то ясно, что функции $|n, -\rangle$ следует продолжить на отрицательную полуось нечетным ($\Psi_{n-}(-|x|) = -\Psi_{n-}(|x|)$), а функции $|n, +\rangle$ — четным ($\Psi_{n+}(-|x|) = \Psi_{n+}(|x|)$) образом. Полученная таким образом система функций будет ортогональна на всей оси и полна на интервале $-\infty < x < \infty$. Аналогичным образом можно построить состояния $|\alpha, -\rangle$ и $|\alpha, +\rangle$, которые при $a = 1/2$ переходят в нечетные и четные когерентные состояния соответственно.

Рассмотрим, наконец, случай, когда $g < -\hbar^2/8m$, т. е. a — чисто мнимое число. В работе [120] показано, что для частоты, не зависящей от времени, можно получить полную систему решений в этом случае, если наложить дополнительное условие на поведение функций в окрестности нуля, которое сводится к тому, что из двух решений, ведущих себя при $x \rightarrow 0$ как $x^{1/2+i|a|}$ и $x^{1/2-i|a|}$, следует выбирать второе. Формула (6.5), в которой вместо a следует писать $-i|a|$, является обобщением полученных в [120] результатов на случай произвольной зависимости частоты от времени.

Рассмотрим теоретико-групповой аспект обсуждаемой задачи. Вернемся сперва к задаче об осцилляторе. Интегралы движения $a^{\dagger 2}$, a^2 и $a^{\dagger}a$, определяемые обычными формулами, можно рассматривать как генераторы группы $U(1,1)$ (или $O(2,1)$), что было сделано в работах [19, 121]. Действительно, выполняются следующие

щие коммутационные соотношения:

$$M_+ = 1/2 a^{\dagger 2}; \quad M_- = -1/2 a^2; \quad M_3 = 1/4 (aa^{\dagger} + a^{\dagger}a); \quad (6.45)$$

$$[M_+, M_-] = 2M_3; \quad [M_3, M_+] = M_+; \quad [M_3, M_-] = -M_-.$$

Эти соотношения определяют алгебру Ли группы $U(1,1)$. Можно посчитать оператор Казимира $M^2 = 1/2 (M_+M_- + M_-M_+) + M_3^2$. Он оказывается равным $M^2 = s(s+1) = -3/16$. Таким образом, все четные уровни реализуют одно неприводимое представление алгебры Ли группы $U(1,1)$, а нечетные — другое. Это — результат работ [19, 121]. Поскольку интегралы движения A, A^{\dagger} и $[A, A^{\dagger}]$ являются обобщением операторов $a^2, a^{\dagger 2}$ и $a^{\dagger}a$, легко перенести и результаты работ [19, 121] на рассматриваемый случай. Вычислим в нашей задаче оператор Казимира $M^2 (M_+ = 1/2 A^{\dagger}; M_- = -1/2 A; M_3 = 1/2 B)$. Проще всего это сделать, вычислив с помощью формул (6.10) средние значения M^2 по состояниям $|n\rangle$ и убедившись, что все они одинаковы:

$$M^2 = 1/4 (B^2 + 2B - AA^{\dagger}) = 1/4 (a^2 - 1). \quad (6.46)$$

Таким образом, все решения обсуждаемого сингулярного осциллятора можно рассматривать как базисные функции одного бесконечномерного неприводимого представления алгебры Ли группы $O(2,1)$, задаваемого оператором Казимира (6.46).

В качестве примера применения метода интегралов движения рассмотрим еще раз неквадратичную систему (6.1) методом инвариантов. Рассмотрим следующие операторы:

$$q_1 = x^2; \quad q_2 = p^2 + 2g/x^2; \quad q_3 = xp + px. \quad (6.47)$$

Если обозначить через Q_j интегралы движения, совпадающие в начальный момент времени с операторами q_j , то нетрудно проверить, что Q_j линейно выражаются через q_j по следующим формулам:

$$\begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \\ Q_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{\mu}^2 & \mu^2 & -\mu\dot{\mu} \\ \dot{\lambda}^2 & \lambda^2 & -\lambda\dot{\lambda} \\ -2\dot{\lambda}\dot{\mu} & -2\lambda\mu & \lambda\dot{\mu} + \dot{\lambda}\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{pmatrix}. \quad (6.48)$$

Функции $\lambda(t)$ и $\mu(t)$ являются решениями уравнения

$$\ddot{z} + \omega^2(t)z = 0, \quad (6.49)$$

удовлетворяющими начальным условиям

$$\lambda(0) = \dot{\mu}(0) = 1; \quad \dot{\lambda}(0) = \mu(0) = 0. \quad (6.50)$$

Функция Грина является решением уравнений типа (5.15):

$$Q_j(x)G(x, x_0, t) = q_j^{\dagger}(x_0)G(x, x_0, t). \quad (6.51)$$

Единственным решением этих уравнений, обращаемым в нуль при $x = x_0 = 0$ и совпадающим с дельта-функцией при $t \rightarrow 0$, является функция

$$G(x, x_0, t) = \mu^{-1} (xx_0)^{1/2} J_a(xx_0\mu^{-1}) \exp \left[-\frac{i}{2}(a+1)\pi + \frac{i}{2\mu}(\mu x^2 + \lambda x_0^2) \right], \quad (6.52)$$

где $a = 1/2(1 + 8g)^{1/2}$ ($\hbar = m = 1$); J_a — функция Бесселя. Итак, мы другим способом вывели формулу (6.4).

§ 7. О нормальных координатах в фазовом пространстве квантовых систем

В § 5 были построены новые уравнения для функции Грина $G(x, x_0, t)$ (где $x = (x_1, x_2, \dots, x_N)$, N — число степеней свободы) произвольной квантовой системы и показано, что эта функция является собственной функцией интегралов движения q_0 , имеющих смысл операторов начальной точки траектории системы. Для одномерного осциллятора и заряда в электромагнитных полях аналогичные уравнения были использованы также в [122]. Цель настоящего параграфа состоит в исследовании свойств симметрии квантовой системы не на основе уравнения Шредингера для волновой функции, зависящей от N переменных x_1, x_2, \dots, x_N , а на основе системы уравнений для функции Грина $G(x, x_0, t)$, зависящей от $2N$ переменных (x, x_0) . 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 (x, x_0) , а не в пространстве N измерений, что позволяет вводить более общие преобразования, чем при рассмотрении уравнения Шредингера для волновой функции (см. [123]). Эти преобразования, очевидно, включают в себя как частный случай все канонические преобразования в фазовом пространстве системы (x, p) . Для доказательства этого достаточно построить преобразование Фурье $G(x, p, t)$ функции Грина $G(x, x_0, t)$ по переменной x_0 .

Уравнения для функции Грина, введенные в § 5, имеют вид

$$\left\{ Q \left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right) - Q' \left(x_0, \frac{\partial}{\partial x_0} \right) \right\} G(x, x_0, t) = 0, \quad (7.1)$$

где $2N$ -мерный операторный вектор Q является интегралом движения, имеющим смысл оператора начальных координат в фазовом пространстве:

$$Q = \begin{pmatrix} p_0 \\ q_0 \end{pmatrix} = UqU^{-1}, \quad q = \begin{pmatrix} -i \frac{\partial}{\partial x} \\ x \end{pmatrix}, \quad (7.2)$$

а $2N$ -мерный вектор Q^i равен $(i \partial/\partial x_0, x_0)$; U — оператор эволюции квантовой системы (функция Грина есть ядро этого оператора в соответствующем представлении).

Под симметрией квантовой системы будем понимать теперь симметрию уравнения (7.1) в смысле определения из первой главы, т. е. существование системы операторов B_i , удовлетворяющих условию

$$(Q - Q') B_i G = 0 \quad (7.3)$$

на классе функций G , удовлетворяющих уравнению (7.1). Такой подход позволяет существенно расширить количество операторов симметрии квантовой системы по сравнению с количеством операторов симметрии уравнения для волновой функции $\Psi(x, t)$. В частности, можно рассматривать все канонические преобразования типа $G'(x, x_0) = SG(x, x_0)$, что эквивалентно переходу к новым операторам: $x \rightarrow S^{-1} x S$; $x_0 \rightarrow S^{-1} x_0 S$; $\partial/\partial x \rightarrow S^{-1} \partial/\partial x S$; $\partial/\partial x_0 \rightarrow S^{-1} \partial/\partial x_0 S$, где ядро оператора S зависит уже от $4N$ переменных.

Далее будем рассматривать еще более частный случай преобразований B_i , сводящихся к замене переменных

$$y = y(x, x_0, t); \quad y_0 = y_0(x, x_0, t). \quad (7.4)$$

Под обобщенными нормальными координатами квантовой системы будем понимать такие переменные y, y_0 , для которых функция Грина может быть представлена в виде произведения N функций $G_k(y_k, y_{0,k}, t)$, каждая из которых зависит только от двух переменных y_k и $y_{0,k}$ ($k = 1, 2, \dots, N$). Существование таких координат означает возможность «расщепления» весьма сложной в общем случае системы интегродифференциальных уравнений (7.1).

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

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} q B(t) q + C(t) q + \Phi(t). \quad (7.5)$$

Согласно [104], функция Грина такой системы имеет вид (очевидно, достаточно ограничиться случаем $C = 0, \Phi = 0$)

$$G(x, x_0, t) = [\det(-2\pi i \lambda_3)]^{-1/2} \exp\left(-\frac{i}{2} x \lambda_3^{-1} \lambda_4 x - 2x \lambda_3^{-1} x_0 + x_0 \lambda_1 \lambda_3^{-1} x_0\right), \quad (7.6)$$

где N -мерные матрицы $\lambda_j, j = 1, 2, 3, 4$, являются элементами некоторой блочной симплектической матрицы. Для простоты мы ограничиваемся здесь случаем $\det \lambda_3 \neq 0$. Но в $2N$ -мерном пространстве векторов $z = (x, x_0)$ всегда существует такое ортогональное преобразование $O(z' = Oz)$, которое диагонализует квадратичную форму в аргументе экспоненты в (7.6). Новые переменные z' и являются обобщенными нормальными координатами. В этих

переменных функция Грина распадается на произведение $2N$ функций, каждая из которых зависит только от одного аргумента. Это означает, что с помощью преобразований (7.4) можно всегда полностью «расцепить» систему уравнений (7.1) для квадратичных систем. Заметим, что если рассматривать функцию Грина в переменных x, p , т. е. проделать фурье-преобразование по переменной x_0 , то преобразование, факторизующее функцию Грина, хотя и является ортогональным в пространстве (x, p) , но не является в общем случае каноническим, т. е. не сохраняет коммутаторы $\{x_j, p_k\}$. Это утверждение следует из результатов работы [125] (см. также [104—107]). В качестве примера укажем на гамильтониан $\mathcal{H} = p_x^2 + xy$. Достаточным условием возможности диагонализации гамильтониана (7.5) и факторизации функции Грина с помощью канонического преобразования является неотрицательная определенность матрицы B в (7.5). Если в системе можно ввести обычные нормальные координаты [99], то вновь введенные обобщенные координаты, очевидно, могут быть сведены к обычным.

Проведенное рассмотрение показывает, что свойства симметрии квантовых систем, обсуждаемые на языке уравнений (7.1), богаче, чем обсуждаемые на языке уравнения Шредингера.

§ 1. Интегралы движения и матрица плотности

В предыдущих главах мы рассмотрели функции Грина и интегралы движения квантовых систем. Целью настоящей главы является обсуждение свойств матриц плотности квантовых систем и их связи с интегралами движения [105, 126], а также исследование стационарных квантовых систем, функций Грина стационарного уравнения Шредингера с квадратичным гамильтонианом и свойств адиабатических инвариантов квантовых систем.

Если гамильтониан квантовой системы не зависит от времени, то матрица плотности задается ядром оператора $e^{-\beta\mathcal{H}}$, где параметр $\beta = T^{-1}$, T — температура. Очевидно, что эта матрица плотности получается простой заменой времени во временной функции Грина квантовой системы $t \rightarrow -i\beta\hbar$, поскольку функция Грина является в этом случае ядром оператора эволюции $\exp(-it\mathcal{H}/\hbar)$. Матрица плотности стационарной квантовой системы $\rho(x, x', \beta)$ удовлетворяет уравнению Блоха $\partial\rho/\partial\beta - \mathcal{H}\rho = i\delta(\beta)\delta(x - x')$ — полному аналогу уравнения для функции Грина квантовой системы. Если мы рассматриваем нестационарную квантовую систему, то ее матрица плотности получается из матрицы плотности $\rho_0 = \exp[-\beta\mathcal{H}(0)]$, заданной в начальный момент времени $t_0 = 0$, с помощью оператора эволюции $U(t)$ согласно формуле

$$\rho(t) = U(t)\rho_0 U^{-1}(t). \quad (1.1)$$

Эта матрица плотности удовлетворяет уравнению $i\hbar \partial\rho/\partial t = [\mathcal{H}, \rho]$ и является интегралом движения для гамильтониана системы $\mathcal{H}(t)$, определяющего оператор эволюции $U(t)$.

Рассмотрим некоторые наборы интегралов движения, зависящих от параметра β и времени t , с целью написать уравнения, связывающие интегралы движения квантовой системы и ее матрицу плотности и являющиеся аналогами соответствующих уравнений для функции Грина. Для этого рассмотрим $2N$ операторов — «интегралов движения» для стационарного гамильтониана $-\mathcal{H}(0)$, зависящих от «времени»:

$$\begin{aligned} \tilde{\pi}(\beta) &= e^{\beta\mathcal{H}(0)} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) e^{-\beta\mathcal{H}(0)}; \\ \tilde{q}(\beta) &= e^{\beta\mathcal{H}(0)} x e^{-\beta\mathcal{H}(0)}. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Построим из этих операторов интегралы движения квантовой системы с гамильтонианом $\mathcal{H}(t)$:

$$\begin{aligned}\pi(t, \beta) &= U(t)\tilde{\pi}(\beta)U^{-1}(t); \\ q(t, \beta) &= U(t)\tilde{q}(\beta)U^{-1}(t).\end{aligned}\quad (4.3)$$

Тогда прямой проверкой нетрудно убедиться, что матрица плотности системы $\rho(x, x', t, \beta)$ связана с инвариантами системы (4.3) и интегралами движения, задающими начальные точки траектории системы в ее фазовом пространстве $X = U(t)xU^{-1}(t)$, $P = U(t)(-i\hbar \partial/\partial x)U^{-1}(t)$, с помощью соотношений

$$\begin{aligned}X(x)\rho(x, x', t, \beta) &= q^T(x')\rho(x, x', t, \beta); \\ P(x)\rho(x, x', t, \beta) &= \pi^T(x')\rho(x, x', t, \beta); \\ \rho(x, x', 0, 0) &= \delta(x - x'),\end{aligned}\quad (4.4)$$

где $q^T(x')$ означает транспонированный оператор q , действующий на аргумент x' .

Уравнения (4.4) связывают матрицу плотности с интегралами движения квантовой системы. В начальный момент $t = 0$ матрица плотности совпадает с равновесной. В тех случаях, когда квантовая система задается квадратичными гамильтонианами, интегралы движения X, P, q, π легко вычисляются, аналогично случаю, разобранному в предыдущей главе, и представляют собой линейные формы по операторам координат и импульсов.

Если операторы P и X задаются матрицей $\Lambda(t)$ и вектором $\delta(t)$ (см. формулы (4.2), (4.3) гл. III), то инварианты (4.3) задаются формулами

$$\begin{pmatrix} \pi \\ q \end{pmatrix} = \Lambda(\beta)\Lambda(t)\begin{pmatrix} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \\ x \end{pmatrix} + \Lambda(\beta)\delta(t) + \delta(\beta),\quad (4.5)$$

где $\Lambda(\beta)$ определяется аналогично матрице $\Lambda(t)$ для случая квадратичного стационарного гамильтониана $\mathcal{H}(0)$, а вектор $\delta(\beta)$ определяется аналогично вектору $\delta(t)$ для этого же гамильтониана. Таким образом, инварианты (4.3) получаются последовательным действием двух симплектических неоднородных преобразований, задаваемых моментами настоящего времени t и «времени» β . Если ввести обозначения

$$\begin{aligned}\Lambda(\beta, t) &= \Lambda^{-1}(t)\Lambda^{-1}(\beta)\Lambda(t); \quad \Lambda(0, 0) = I; \\ \delta(\beta, t) &= \Lambda^{-1}(t)[\delta(t) + \Lambda^{-1}(\beta)\delta(\beta)],\end{aligned}\quad (4.6)$$

то уравнения (4.4) переписутся в форме, полностью эквивалентной уравнениям для функции Грина квадратичной квантовой системы, рассмотренным в гл. III. Поэтому выражение для матрицы плотности совпадает с функцией Грина с учетом введенных обозначений и начального условия на матрицу плотности при $t = 0$. При этом в выражении для временной функции Грина достаточно сделать замены $\Lambda(t) \rightarrow \Lambda(\beta, t)$ и $\delta(t) \rightarrow \delta(\beta, t)$. В частном случае

Стационарных квадратичных гамильтонианов матрица плотности совпадает с функцией Грина квадратичной системы, при этом сделана замена времени $t \rightarrow -i\beta\hbar$ и матрица $\Lambda(\beta)$ имеет простой вид.

Используя явное выражение для матрицы плотности, можно подсчитать средние значения произведений координат $\langle x_1^{n_1} x_2^{n_2} \dots x_N^{n_N} \rangle$. Соответствующий интеграл уже вычислялся при рассмотрении функции Грина в дискретном базисе, и поэтому ответ может быть выражен через полином Эрмита от N переменных. В случае положительно определенного гамильтониана справедлива обобщенная теорема Блоха [105, 126], согласно которой в состоянии термодинамического равновесия функция распределения собственных значений любой линейной вещественной комбинации операторов обобщенных координат и импульсов имеет вид распределения Гаусса. Эта теорема была в одномерном случае доказана Блохом [127] (см. также [128]). Это утверждение просто вытекает из явного вида матрицы плотности как экспоненты от квадратичной формы по координатам x и x' . Более того, утверждение остается верным и для матрицы плотности нестационарной квадратичной формы, поскольку ее вид также определяется экспонентой от квадратичной формы. При этом параметры гауссова распределения зависят от времени. Формула для матрицы плотности в представлении когерентных состояний также получается из соответствующего выражения для функции Грина с учетом формул (1.6). Поскольку матрица плотности имеет простой вид, легко подсчитывается характеристическая функция $\langle e^{i\alpha Q} \rangle$, являющаяся производящей функцией для средних значений степеней координат и импульсов, а также функция Вигнера [129]

$$W(R, p) = \int \rho \left(R + \frac{1}{2} x, R - \frac{1}{2} x, \beta \right) \exp \left(\frac{-ipx}{\hbar} \right) dx. \quad (1.7)$$

Интегралы для этих функций являются гауссовыми и стандартным образом вычисляются.

§ 2. Функции Грина стационарного уравнения Шредингера квадратичных квантовых систем

Рассмотрим в настоящем параграфе задачу о нахождении функции Грина стационарного уравнения Шредингера, отвечающего случаю не зависящего от времени гамильтониана.

В координатном представлении эта функция Грина G — ядро оператора $(\mathcal{H} - E)^{-1}$ удовлетворяет следующему уравнению:

$$(\mathcal{H} - E)G(x_1, x_2, E) = \delta(x_1 - x_2), \quad (2.1)$$

являющемуся следствием операторного тождества

$$(\mathcal{H} - E)(\mathcal{H} - E)^{-1} = I, \quad (2.2)$$

записанного в координатном представлении. Гамильтониан \mathcal{H} действует на координату x_1 . Функция Грина стационарного уравнения Шредингера $G(2, 1; E)$ может быть выражена с помощью ряда (или интеграла), если известны собственные функции Ψ_{E_n} (в любом представлении) гамильтониана \mathcal{H} , а именно:

$$G(2, 1; E) = \sum_n \frac{\Psi_{E_n}^*(2) \Psi_{E_n}(1)}{E_n - E}. \quad (2.3)$$

Здесь $G(2, 1; E)$ означает функцию Грина в любом представлении (координатном, импульсном, представлении когерентных состояний и т. д.), причем цифры 1 и 2 означают начальные и конечные точки в любом представлении (x_1, x_2 — в координатном, p_1, p_2 — в импульсном, α_1, α_2^* — в представлении когерентных состояний).

Действительно, подействуем на выписанный ряд оператором $\mathcal{H} - E$, действующим на координату 1 в функциях $\Psi_{E_n}(1)$. Тогда, поскольку эти функции являются собственными для гамильтониана

$$\mathcal{H} \Psi_{E_n}(1) = E_n \Psi_{E_n}(1), \quad (2.4)$$

мы получаем

$$\begin{aligned} (\mathcal{H} - E) G(2, 1; E) &= \sum_n \frac{(E_n - E) \Psi_{E_n}^*(2) \Psi_{E_n}(1)}{E_n - E} = \\ &= \sum_n \Psi_{E_n}^*(2) \Psi_{E_n}(1). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Полученный ряд есть ядро единичного оператора в соответствующем представлении, поскольку система функций $\Psi_{E_n}(1)$ полна. В координатном представлении имеем

$$\sum_n \Psi_{E_n}^*(x_2) \Psi_{E_n}(x_1) = \delta(x_2 - x_1). \quad (2.6)$$

Таким образом, выражение (2.3) действительно является решением уравнения (2.1). Функция Грина $G(2, 1; E)$ может быть найдена, если известна временная функция Грина квантовой системы $G(2, 1; t)$. Эти функции связаны соотношением

$$G(2, 1; E) = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} G(2, 1; t) e^{iEt/\hbar} dt. \quad (2.7)$$

В соотношении (2.7) подынтегральное выражение может иметь особенности, которые необходимо принимать во внимание. Часто удобнее пользоваться не формулой (2.7), а получать функцию Грина $G(2, 1; E)$ из функции Грина $G(2, 1; \beta)$ уравнения Блоха (см. (2.9) гл. I). Соответствующее соотношение полностью ана-

логично (2.7) и имеет вид

$$G(2, 1; E) = \int_0^{\infty} G(2, 1; \beta) e^{\beta E} d\beta, \quad \operatorname{Re} \beta < 0. \quad (2.8)$$

При значениях энергий таких, что $\operatorname{Re} E > 0$, функция Грина получается с помощью аналитического продолжения выражения (2.8). Выражение (2.8) есть не что иное, как преобразование Лапласа функции Грина $G(2, 1; \beta)$.

Рассмотрим теперь функции Грина стационарного уравнения Шредингера некоторых квантовых систем, описываемых квадратичными гамильтонианами, следуя работам [104—107, 111]. Как видно из формулы (2.3), если известна функция Грина $G(2, 1; E)$, то ее полюсы в комплексной плоскости переменной E дают значения энергий, принадлежащих дискретному спектру гамильтониана системы \mathcal{H} . Чтобы вычислить функцию Грина стационарного уравнения Шредингера для одномерного гармонического осциллятора, удобно работать в представлении когерентных состояний, поскольку в этом представлении волновая функция $\Psi_{E_n}(\alpha)$ имеет очень простой вид (см. (5.46) гл. III):

$$\Psi_{E_n}(\alpha) = \langle n | \alpha \rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}; \quad E_n = \hbar\omega(n + 1/2). \quad (2.9)$$

Подставляя это выражение в формулу (2.3), мы сразу получаем

$$G(\alpha_2^*, \alpha_1; E) = \frac{e^{-|\alpha_1|^2/2 - |\alpha_2|^2/2}}{\hbar\omega} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha_1 \alpha_2^*)^n}{n! [n - E/\hbar\omega + 1/2]}. \quad (2.10)$$

Ряд (2.10) определяет вырожденную гипергеометрическую функцию Φ или неполную гамма-функцию γ (см. [88]). Окончательное выражение может быть записано в виде

$$G(\alpha_2^*, \alpha_1; E) = (\hbar\omega)^{-1} e^{-|\alpha_1|^2/2 - |\alpha_2|^2/2} (1/2 - E/\hbar\omega)^{-1} e^{\alpha_1 \alpha_2^*} \times \\ \times \Phi(1; 3/2 - E/\hbar\omega; -\alpha_1 \alpha_2^*). \quad (2.11)$$

Это же выражение можно получить с помощью формулы (2.7), поскольку временная функция Грина гармонического осциллятора в представлении когерентных состояний (матричный элемент оператора эволюции U между когерентными состояниями α_1 и α_2) имеет вид (см. (5.43) гл. III)

$$G(\alpha_2^*, \alpha_1; t) = \langle \alpha_2 | U(t) | \alpha_1 \rangle = \\ = \exp\{-it/2 - |\alpha_1|^2/2 - |\alpha_2|^2/2 + \alpha_1 \alpha_2^* e^{-it}\}. \quad (2.12)$$

Мы для простоты взяли случай $\omega = 1$, $\hbar = 1$. Поэтому в безразмерных переменных имеем интеграл

$$G(\alpha_2^*, \alpha_1; E) = ie^{-|\alpha_1|^2/2 - |\alpha_2|^2/2} \int_0^{\infty} \exp\left[\alpha_1 \alpha_2^* e^{-it} + i\left(E - \frac{1}{2}\right)t\right] dt, \quad (2.13)$$

являющийся табличным (см. [88]) и приводящийся к виду (2.11). Однако, пользуясь формулой (2.13), нам легко вычислить функцию Грина стационарного уравнения Шредингера для заряженной частицы, движущейся в постоянном и однородном магнитном поле. Поскольку в базисе когерентных состояний временная функция Грина имеет вид (в безразмерных переменных)

$$G(\alpha_2^*, \beta_2^*; \alpha_1, \beta_1; t) = \exp[-1/2(it + |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + |\beta_1|^2 + |\beta_2|^2) + \beta_1\beta_2^* + \alpha_1\alpha_2^*e^{-it}], \quad (2.14)$$

то вычисление стационарной функции Грина, по существу, сводится к взятию того же интеграла типа (2.13). Поэтому ответ выписывается сразу и имеет вид (мы выпишем ответ в обычных переменных)

$$G = (\hbar\omega)^{-1}(1/2 - E/\hbar\omega)^{-1} \exp[-1/2(|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + |\beta_1|^2 + |\beta_2|^2) + \alpha_1\alpha_2^* + \beta_1\beta_2^*] \Phi(1; 3/2 - E/\hbar\omega; -\alpha_1\alpha_2^*). \quad (2.15)$$

Это выражение было получено в [130, 107].

Можно было бы получить выражение (2.15) тем же способом, которым была получена функция Грина (2.11) для гармонического осциллятора. Однако этот способ потребовал бы перегруппировки членов в двойном ряде и некоторых выкладок. Можно перейти в координатное представление с помощью общей формулы

$$G(x_2, x_1; E) = \pi^{-2N} \int G(\alpha_2^*, \alpha_1; E) \langle x_2 | \alpha_2 \rangle \langle \alpha_1 | x_1 \rangle d^2\alpha_2 d^2\alpha_1. \quad (2.16)$$

Для заряда e в магнитном поле H интеграл берется, поскольку произведение $\langle x_2 | \alpha_2 \rangle \langle \alpha_1 | x_1 \rangle$ есть квадратичная экспонента, и ответ имеет вид [130]

$$G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; E) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right) \rho^{-1} f(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) W_{E/\hbar\omega, 0}(\rho^2); \quad (2.17)$$

здесь

$$\rho^2 = \frac{m\omega}{2\hbar} (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)^2; \quad \mathbf{r} = (x, y);$$

$$f(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \exp\left[\frac{im\omega}{2\hbar} (x_1y_2 - x_2y_1)\right],$$

а W есть функция Уиттекера (см. [88]). Полюсы функции Грина и в координатном представлении, и в представлении когерентных состояний находятся в точках спектра $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$; $n = 0, 1, \dots, \infty$. Этот же ответ (2.17) можно получить, используя известную функцию Грина $G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; \beta)$ [90] в координатном представлении:

$$G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; \beta) = \frac{m\omega}{4\pi\hbar} \left[\text{sh}\left(\frac{1}{2} \hbar\omega\beta\right) \right]^{-1} f(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \times \\ \times \exp\left[-\frac{1}{2} \rho^2 \text{cth}\left(\frac{1}{2} \hbar\omega\beta\right)\right], \quad (2.18)$$

где $f(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ дается формулой (2.17). Вычисляя интеграл (2.8) с функцией (2.18) (см. [88]), мы опять получаем ответ (2.17). Таким

способом формула (2.17) была получена впервые в работе [130]. Можно также выписать удобную для больших значений величины ρ формулу для функции $G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; E)$ [130], используя связь между функцией Уиттекера и функцией ${}_2F_0$ (см. [88]), а именно:

$$G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; E) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right) f(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \rho^2 \left(2\frac{E}{\hbar\omega} - 1\right) e^{-\rho^2/2} \times \\ \times \left\{1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right)\left(\frac{3}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right) \dots \left(n - \frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right)\right]^2 (-\rho^2)^{-n}\right\}. \quad (2.19)$$

Обсудим теперь общий случай квадратичного стационарного гамильтониана, сводящегося с помощью канонического симплектического линейного преобразования к виду

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^N (\omega_j a_j^\dagger a_j) + \Phi; \quad \omega_j > 0 \quad (\hbar = 1). \quad (2.20)$$

Здесь a_j — бозонные операторы уничтожения, $[a_j, a_k^\dagger] = \delta_{jk}$. Постоянное слагаемое Φ можно убрать каноническим преобразованием, поэтому мы считаем для простоты $\Phi = 0$. Спектр энергий неизотропного гармонического осциллятора (2.20) имеет вид

$$E_{n_1, \dots, n_N} = \omega_1 n_1 + \omega_2 n_2 + \dots + \omega_N n_N. \quad (2.21)$$

Удобно работать в представлении когерентных состояний, поскольку временная функция Грина в этом представлении не имеет при $t = 0$ особенностей. Используем для расчета функции Грина стационарного уравнения Шредингера формулу (2.3). Собственные функции гамильтониана \mathcal{H} (2.20) в представлении когерентных состояний имеют вид

$$\Psi_{E_{n_1, \dots, n_N}} = \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N |a_j|^2\right] \prod_{j=1}^N \frac{(a_j)^{n_j}}{(n_j!)^{1/2}}. \quad (2.22)$$

Введем новую специальную функцию (см. [107, 111])

$$Q(z_1, \dots, z_N, \omega_1, \dots, \omega_N; E) = \\ = \sum_{n_1, \dots, n_N=0}^{\infty} \frac{z_1^{n_1} \dots z_N^{n_N}}{n_1! \dots n_N!} (\omega_1 n_1 + \dots + \omega_N n_N - E)^{-1}. \quad (2.23)$$

Эта функция очень похожа на гипергеометрическую функцию и сводится к ней при $\omega_1 = \omega_2 = \dots = \omega_N$:

$$Q(z_1, \dots, z_N, \omega, \dots, \omega; E) = \\ = -E^{-1} \exp\left(\sum_{j=1}^N z_j\right) \Phi\left(1; 1 - \frac{E}{\omega}; -\sum_{j=1}^N z_j\right). \quad (2.24)$$

Здесь Φ — вырожденная гипергеометрическая функция. Функция Q может быть записана также через неполную гамма-функцию (см. [88]):

$$Q(z_1, \dots, \omega, \dots, \omega; E) = \omega \left(-\sum_{j=1}^N z_j \right)^{E/\omega} \gamma \left(-\frac{E}{\omega}; -\sum_{j=1}^N z_j \right). \quad (2.25)$$

Используя новую функцию, аналитическую по переменным z_j ($j = 1, \dots, N$), можно выписать функцию Грина стационарного уравнения Шредингера с гамильтонианом (2.20) в виде

$$G(\alpha_1^*, \dots, \alpha_N^*, \beta_1, \dots, \beta_N; E) = \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (|\alpha_j|^2 + |\beta_j|^2) \right] Q(\alpha_1^* \beta_1, \dots, \alpha_N^* \beta_N, \omega_1, \dots, \omega_N; E). \quad (2.26)$$

Переходя к координатному представлению с помощью формулы (2.16), мы можем сразу написать интегральное представление для функции Грина стационарного уравнения Шредингера $G(\mathbf{x}, \mathbf{y}; E)$

через специальную функцию Q . Пусть $\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (p_j^2 + \omega_j^2 x_j^2 - 1)$;

тогда имеем формулу

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{y}; E) = \int d^2\alpha d^2\beta \exp \left\{ - \left[\sum_{j=1}^N \frac{\omega_j}{2} (x_j^2 + y_j^2) - (2\omega_j)^{1/2} (\alpha_j x_j + \beta_j^* y_j) + \frac{1}{2} (\alpha_j^2 + \beta_j^{*2}) + \frac{1}{2} (|\alpha_j|^2 + |\beta_j|^2) \right] \right\} \left[\prod_{j=1}^N (\omega_j)^{1/2} \right] \times \pi^{-3/2} Q(\alpha_1^* \beta_1, \dots, \alpha_N^* \beta_N, \omega_1, \dots, \omega_N; E). \quad (2.27)$$

Интегрирование в этой формуле ведется по $4N$ действительным переменным, отвечающим интегрированию по начальным и конечным точкам фазового пространства N -мерного гармонического осциллятора.

Используя формулу (2.25) и интегральное представление для $\gamma(c, x)$ (см. [88]), можно получить интегральное представление для функции Грина $G(\mathbf{x}, \mathbf{y}; E)$ изотропного многомерного осциллятора с гамильтонианом $\mathcal{H} = \frac{1}{2}(p^2 + \mathbf{x}^2)$ (мы для простоты взяли случай $\omega = 1$, $\hbar = 1$):

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{y}; E) = \frac{\pi^{1/2}}{\sin \pi(1/2 - E)} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x}^2 + \mathbf{y}^2) \right] \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{(1 - e^{2i\theta})^{1/2}} \times \exp \{ i\theta(1/2 - E) - [e^{2i\theta}(\mathbf{x}^2 + \mathbf{y}^2) + 2e^{i\theta}\mathbf{x}\mathbf{y}] (1 - e^{2i\theta})^{-1} \}. \quad (2.28)$$

Этот интеграл можно выразить через функции параболического цилиндра, поскольку через эти функции в [112] было получено выражение для функции Грина $G(x, y; E)$.

§ 3. Соотношение неопределенности энергия — время для нестационарных квантовых систем

Открытое Гейзенбергом [132] соотношение неопределенности $\Delta p \Delta x \sim \hbar$ явилось основой для согласования корпускулярной и волновой картин в квантовой механике [133].

Понимаемым вначале эвристически неопределенностям Δp и Δx вскоре был придан общепринятый теперь смысл среднеквадратичных отклонений координаты и импульса, и было найдено Вейлем [134] вопреки во все учебники по квантовой механике математическое доказательство этого соотношения. Соотношение неопределенности для координаты и импульса вызвало желание получить аналогичное соотношение для других канонически сопряженных величин, таких, как, например, проекция момента импульса и угол поворота, переменная действия и угол и другие. Однако эти попытки встретили на своем пути значительные математические трудности, связанные с особыми спектральными свойствами этих операторов. Современное состояние проблемы соотношения неопределенности для величин типа действие — угол отражено в обзоре Карузерса и Нието [135].

Особое положение как в связи с физической интерпретацией, предложенной впервые Бором [136], так и с математическим доказательством занимает соотношение неопределенности для величин энергия — время. На особенную роль этого соотношения в вопросе о воспроизводимых измерениях различных физических величин было указано в работе Ландау и Пайерлса [137].

С другой стороны, делались многочисленные попытки подобрать такой оператор, чтобы его среднеквадратичное отклонение играло роль Δt . Этот оператор тесно связан с временем задержки, введенным Вигнером [140], в задачах рассеяния и распада возбужденных состояний. Отметим в этой связи работы Смита [138], Липшмана [139], где такой оператор был построен, а также дальнейшие работы Лурката [141] и Флеминга [142].

Двойственная роль соотношения неопределенности энергия — время была подчеркнута в работе Фока и Крылова [143], где это соотношение было проанализировано в связи с временем распада квазистационарных состояний. Особенно острая дискуссия велась в работах Аронова — Бома [144] и Фока [145] относительно физической интерпретации этого соотношения.

В работе Мандельштама и Тамма [146] был описан некоторый класс времен неопределенности, когда любому оператору физической величины можно сопоставить свое время неопределенности, которое связано с соответствующим гейзенберговским уравнением движения.

Следуя этой идее, Эберли и Сингх [147] для стационарной системы, матрица плотности которой удовлетворяет уравнению Лиувилля

$$\dot{\rho} = (i/\hbar)[\rho, \mathcal{H}], \quad (3.1)$$

ввели параметр — «время стационарности» T_s :

$$1/T_s^2 = \langle (\Delta \dot{\rho})^2 \rangle. \quad (3.2)$$

В [147] было показано, что T_s может играть роль Δt в соотношении неопределенности энергия— время

$$\Delta E T_s \geq \hbar, \quad (3.3)$$

где $(\Delta E)^2 = \langle (\Delta \mathcal{H})^2 \rangle$, причем среднеквадратичное отклонение для оператора A вычисляется по обычной формуле $\langle (\Delta A)^2 \rangle = \text{Sp } \rho (A - \bar{A})^2$, $\bar{A} = \text{Sp } \rho A$. На ряде простых примеров в [147] было продемонстрировано, что «время стационарности» T_s совпадает с вводимыми эвристически неопределенностями Δt . В частности, время T_s совпадает с временем жизни в приближении Вигнера — Вайскопфа [148].

Следуя [131], рассмотрим для нестационарной системы функцию времени $T(t)$, которая в случае стационарной системы не зависит от времени и совпадает с временем T_s :

$$1/T^2(t) = \text{Sp } \rho \dot{\rho}^2 - (\text{Sp } \rho \dot{\rho})^2. \quad (3.4)$$

Оказывается, что соотношение неопределенности в виде (3.3) остается справедливым и для нестационарных систем, если вместо T_s в него подставить функцию $T(t)$ *). Доказательство соотношения (3.4) в стационарном случае проведено в работе [147] при специальном выборе базиса. Ниже приведен вывод (3.3), справедливый и в нестационарном случае, в форме, явно не зависящей от выбора базиса.

Хорошо известно, что для двух эрмитовых операторов A и B и их коммутатора $[A, B] = iC$ справедливо соотношение неопределенности в форме

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq 1/4 | \langle C \rangle |^2, \quad (3.5)$$

где $\langle (\Delta A)^2 \rangle = \text{Sp } \rho (A - \bar{A})^2$; $\langle (\Delta B)^2 \rangle = \text{Sp } \rho (B - \bar{B})^2$; $\langle C \rangle = \text{Sp } \rho C$. Положим теперь, что $A = \mathcal{H}$, $B = \hbar \dot{\rho}$; тогда в силу (3.1) $C = [\mathcal{H}, [\rho, \mathcal{H}]]$, а соотношение (3.5) с учетом (3.4) принимает вид

$$(\Delta E)^2 \hbar^2 / T^2 \geq 1/4 (\text{Sp} [\mathcal{H}, [\rho, \mathcal{H}]] \rho)^2. \quad (3.6)$$

Используя уравнение Лиувилля и тождество $\text{Sp}[A, B]C = \text{Sp}[C, A]B$, находим, что

$$\hbar^2 / T^2 = \text{Sp } \dot{\rho}^2 \rho = 1/2 \text{Sp } \rho^2 [\mathcal{H}, [\mathcal{H}, \rho]]. \quad (3.7)$$

*) Здесь и в дальнейшем рассматриваются только такие матрицы плотности, для которых шпурь, входящие в определение $T(t)$, существуют.

Так как $\rho^2 \leq \rho$, то из (3.6) и (3.7) следует

$$(\Delta E)^2 \hbar^2 / T^2 \geq 1/4 (\text{Sp}[\mathcal{H}, [\rho, \mathcal{H}] \rho])^2 \geq (\hbar^2 / T^2)^2, \quad (3.8)$$

что эквивалентно (3.3) при условии $T < \infty$. Соотношение (3.3) (или (3.8)) обращается в равенство при условии $\rho^2 = \rho$, т. е. для чистых состояний, что отмечалось в [147], и при условии $T < \infty$.

Наряду с временем $T(t)$, можно рассмотреть и другой параметр: $\tau(t)$, который тоже может играть роль времени в соотношении неопределенности. Определим новое время $\tau(t)$ (в случае стационарных и нестационарных систем) соотношением

$$\tau^{-2} = \text{Sp} \dot{\rho}^2; \quad (3.9)$$

тогда справедливо соотношение неопределенности энергия — время в форме

$$\tau \Delta E \geq 1/2 \hbar. \quad (3.10)$$

Действительно, представим (3.6) в виде

$$(\Delta E)^2 \text{Sp} \dot{\rho}^2 \rho \geq 1/4 (\text{Sp} \rho^2)^2 \hbar^2. \quad (3.11)$$

Очевидно, что

$$\text{Sp} \rho^2 \geq \text{Sp} \dot{\rho}^2 \rho. \quad (3.12)$$

Из (3.11) и (3.12) следует неравенство

$$(\Delta E)^2 \text{Sp}(\dot{\rho}^2) \geq 1/4 (\text{Sp} \dot{\rho}^2)^2 \hbar^2, \quad (3.13)$$

которое при $\tau < \infty$ эквивалентно (3.10).

Неравенство (3.12) показывает, что

$$T > \tau. \quad (3.14)$$

Для чистых состояний $\rho^2 = \rho$ времена T и τ равны и соотношение (3.3) превращается в равенство.

При выводе соотношения неопределенности энергия — время в форме (3.3) и (3.10) было использовано условие, что T и τ ограничены.

Теперь сформулируем для стационарных систем условия, когда T и τ обращаются в бесконечность. Заметим, что в стационарном случае эволюция матрицы плотности описывается уравнением

$$\rho_t = e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} \rho_0 e^{i\mathcal{H}t/\hbar} \quad (3.15)$$

и времена стационарности T_s и τ_s определяются только по начальной матрице плотности:

$$\hbar^2 / T_s^2 = \text{Sp}[\mathcal{H}, \rho_0] [\rho_0, \mathcal{H}] \rho_0, \quad \hbar^2 / \tau_s^2 = \text{Sp}[\mathcal{H}, \rho_0] [\rho_0, \mathcal{H}]. \quad (3.16)$$

Время стационарности τ_s равно бесконечности, т. е. $\text{Sp} \dot{\rho}^2 = 0$, тогда и только тогда, когда матрица плотности начального состояния ρ_0 описывает либо стационарные состояния, либо их смесь,

т. е. имеет вид

$$\rho_0 = \sum W_E |\varphi_E\rangle \langle \varphi_E|, \quad (3.17)$$

где $|\varphi_E\rangle$ — стационарные состояния гамильтониана \mathcal{H} : $\mathcal{H}|\varphi_E\rangle = E|\varphi_E\rangle$. Из (3.14) ясно, что условие (3.17) является достаточным для обращения T_s в бесконечность. Обращение T_s и τ_s в бесконечность связано с наличием у системы интегралов движения. Действительно, в стационарном случае сам оператор \mathcal{H} является интегралом движения. Совершенно очевидно, что времена стационарности T_s и τ_s равны бесконечности в случае, когда в качестве матрицы плотности ρ_0 выбрана матрица, отвечающая равновесному распределению Гиббса:

$$\rho_0 = Z_0^{-1} e^{-\mathcal{H}/kT}, \quad Z_0 = \text{Sp } e^{-\mathcal{H}/kT}, \quad (3.18)$$

хотя $\langle (\Delta\mathcal{H})^2 \rangle > 0$.

Пусть система описывается гамильтонианом \mathcal{H} и обладает полной системой интегралов движения L_i , $i = 1, \dots, N$, не зависящих явно от времени:

$$[L_i, \mathcal{H}] = 0. \quad (3.19)$$

Рассмотрим стационарные состояния, отвечающие этому полному набору интегралов движения:

$$\begin{aligned} L_i |l_i, E_n\rangle &= l_i |l_i, E_n\rangle, \\ \mathcal{H} |l_i, E_n\rangle &= E_n |l_i, E_n\rangle. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Вообще говоря, энергия системы зависит от квантовых чисел l_i : $E_n = E_n(l_i)$; например, энергия $E_{n,i}$ зависит от орбитального момента в центральном поле (хотя при наличии высшей симметрии возможно «случайное вырождение», как, например, в задаче о трехмерном изотропном осцилляторе или атоме водорода, когда энергия не зависит от орбитального момента).

Рассмотрим матрицу плотности вида (3.17):

$$\rho_0 = \sum_{E_n, l_i} W(l_i) |l_i, E_n\rangle \langle l_i, E_n|. \quad (3.21)$$

Так как E_n , вообще говоря, зависит от квантовых чисел, то $\langle (\Delta\mathcal{H})^2 \rangle > 0$, а T_s и τ_s , как видно из (3.19) и уравнения Лиувилля, обращаются в бесконечность.

В качестве простейшего примера рассмотрим движение спина, равного $1/2$, в постоянном однородном магнитном поле \mathbf{H} . Матрица плотности этой системы, как известно, имеет вид $\rho = 1/2 (E + \sigma_i S_i)$, где σ_i — матрица Паули, а гамильтониан $\mathcal{H} = -\mu_B g (\mathbf{H}\boldsymbol{\sigma})$.

Выберем ось z вдоль магнитного поля, тогда уравнение Лиувилля (3.1) переходит в систему уравнений для вектора S_i :

$$S_+ = -i\omega S_+; \quad S_- = +i\omega S_-; \quad S_z = 0, \quad (3.22)$$

где $S_+ = S_x + iS_y$; $S_- = S_x - iS_y$; $\omega = \mu_B g H/\hbar$. Очевидно, что уравнение Лиувилля обладает интегралом движения $L = \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}$.

Вычислим теперь $\langle(\Delta\hat{H})^2\rangle$ и T_s^2 для матрицы плотности $\rho = 1/2(E + \sigma_i S_i)$. Находим, что

$$\langle(\Delta\mathcal{H})^2\rangle = \hbar^2\omega^2(1 - S_z^2), \quad (3.23)$$

а времена стационарности T_s и τ_s совпадают:

$$\tau_s^{-2} = T_s^{-2} = \omega^2(S_x^2 + S_y^2). \quad (3.24)$$

Тогда при условиях $S_x^2 + S_y^2 > 0$, $T_s < \infty$ находим, что соотношение неопределенности энергия — время имеет вид

$$\Delta E T_s = \hbar \sqrt{(1 - S_z^2)/(S_x^2 + S_y^2)} \geq \hbar. \quad (3.25)$$

Последнее неравенство очевидно в силу того, что $S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 \leq 1$. В случае чистого состояния $S^2 = 1$ и $S_x^2 + S_y^2 > 0$, а $T_s < \infty$ и $(\Delta\mathcal{H})^2 T_s^2 = \hbar^2$, что находится в полном согласии с (3.8). Однако наличие интеграла движения S_z приводит и к другой возможности: пусть $S_x = S_y = 0$; тогда матрица плотности имеет вид $\rho = 1/2(E + S\sigma_z)$, причем $S < 1$ и $(\Delta\mathcal{H})^2 = \hbar^2\omega^2(1 - S^2) > 0$, однако $\tau_s = T_s = \infty$.

Для выяснения физического смысла функции $T(t)$ и возможности ее использования для решения конкретных задач обсудим процесс измерения энергии в некоторой нестационарной системе, описываемой гамильтонианом

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + V(t), \quad (3.26)$$

где $V(t) = 0$ при $t \leq 0$ и $\lim_{t \rightarrow \infty} V(t) = 0$.

В начальный момент времени задана матрица плотности $\rho_0 = \sum W_n |n\rangle\langle n|$, где $|n\rangle$ — стационарные состояния гамильтониана \mathcal{H}_0 :

$$\mathcal{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (3.27)$$

Уравнение Лиувилля с начальным условием $\rho_t|_{t=0} = \rho_0$ определяет эволюцию матрицы плотности ρ_t . Пусть в момент времени t производится измерение энергии \mathcal{H}_0 , которое описывается процессом «1» согласно фон Нейману ([149], стр. 261). В результате измерения энергии система, после измерения, будет находиться в состоянии, характеризуемом матрицей плотности

$$\tilde{\rho}_t = \sum |n\rangle\langle n| \tilde{W}_n(t), \quad (3.28)$$

где $\tilde{W}_n(t) = \langle n | \rho_t | n \rangle$.

Используя ρ_t , легко подсчитать E_t и $(\Delta E_t)^2$ по известным формулам:

$$E_t = \text{Sp}(\rho_t \mathcal{H}_0); \quad (3.29)$$

$$(\Delta E_t)^2 = \text{Sp}\{\rho_t (\mathcal{H}_0 - E_t)^2\}. \quad (3.30)$$

Таким образом, было произведено два измерения энергии: первое при $t = 0$ — этому измерению отвечает матрица плотности ρ_0 , которая определяет среднюю энергию E_0 и дисперсию ΔE_0 , — и второе в момент времени t — с матрицей плотности ρ_t , средней энергией E_t и дисперсией ΔE_t . Изменение средней энергии обозначим $\delta E = E_t - E_0$. Естественно выбрать в качестве критерия того, что распределения $W_n(0)$ и $W_n(t)$ существенно различаются (в духе критерия разрешения Релея в спектроскопии), условие

$$|\delta E| \geq \Delta E_0 + \Delta E_t; \quad (3.31)$$

их отличие может быть обнаружено в результате измерения средней энергии. Для простоты исследования (3.31) будем считать, что вначале, при $t = 0$, система находится в стационарном состоянии $|n_0\rangle$ с энергией E_{n_0} , тогда $\Delta E_0 = 0$. Для оценки ΔE_t используем (3.2) и соотношение неопределенности (3.3), тогда (3.31) принимает вид

$$|\delta E| \geq \hbar T^{-1}(t); \quad |\delta E| \geq 1/2 \hbar \tau^{-1}(t). \quad (3.32)$$

Формула (3.32) позволяет определить, в какой момент нужно произвести измерение энергии, чтобы разрешить энергию начального и конечного состояний с точностью δE .

Переходя в формуле (3.32) к пределу $t \rightarrow +\infty$, получаем соотношение неопределенности в виде

$$|\delta E| T \geq \hbar; \quad |\delta E| \tau \geq 1/2 \hbar, \quad (3.33)$$

где $T = \lim_{t \rightarrow \infty} T(t)$, $\tau = \lim_{t \rightarrow \infty} \tau(t)$. В такой форме в рамках теории возмущений соотношение неопределенности обсуждается в [53].

Проиллюстрируем вышеизложенное на примере возбуждения гармонического осциллятора зависящей от времени внешней силой. Гамильтониан этой системы имеет вид

$$\mathcal{H}(t) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 + f(t)x, \quad (3.34)$$

где $f(t) = 0$ при $t \leq 0$ и $\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = 0$. Пусть в начальный момент $t = 0$ осциллятор находится в основном состоянии с волновой функцией $\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{x_0} \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$, где $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Легко показать, что решение уравнения Шредингера, отвечающее гамильтониану (3.34) и имеющее Ψ_0 в качестве начального условия, имеет вид

$$\Psi_t(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0} \sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{x^2}{2x_0^2} + \delta(t)x + i\varphi_0(t)\right], \quad (3.35)$$

где $\delta(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega(\tau-t)} f(\tau) d\tau$, а $\varphi_0(t) = -\frac{\omega t}{2} + \frac{\hbar}{2m} \int_0^t \delta^2(\tau) d\tau$.

Отметим, что состояние (3.35) является когерентным состоянием осциллятора [94].

Матрица плотности $\rho_t = |\Psi_t\rangle \langle \Psi_t|$ определяет матрицу плотности $\bar{\rho}_t$ (3.28), где $|n\rangle$ — стационарное состояние осциллятора с энергией $\hbar\omega (n + 1/2)$, а вероятности $W_n = (\bar{n}^n e^{-\bar{n}})/n!$ являются распределением Пуассона с $\bar{n} = \sum_{n=0}^{\infty} n W_n = 1/2 x_0^2 \delta \delta^*$. Ясно, что

$$E_t = 1/2 \hbar \omega (1 + x_0^2 \delta \delta^*); \quad \Delta E = \hbar \omega \sqrt{x_0^2 \delta \delta^*/2}. \quad (3.36)$$

Используя явное выражение для матрицы плотности ρ_t , вычисляем по формуле (3.4) функцию $T(t)$, которая имеет вид

$$T(t) = \sqrt{2} (\hbar \omega \sqrt{x_0^2 \delta \delta^*})^{-1}. \quad (3.37)$$

В случае, когда $f(t)$ равно f_0 на интервале $0 \leq t \leq \tau$ и 0 вне него, функция δ равна

$$\begin{aligned} \delta_t &= e^{-i\omega t} \delta_0 && \text{при } t < \tau; \\ \delta_0 &= f_0 (1 - e^{i\omega \tau}) (\hbar \omega)^{-1} && \text{при } t > \tau. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Вышеизложенное в случае $\omega T \gg 1$ допускает простую классическую интерпретацию на фазовой плоскости p, q или, что более удобно, в комплексной плоскости когерентных состояний α :

$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{ip}{\sqrt{\hbar m \omega}} + q \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} \right)$. При $t=0$ система находилась в когерентном состоянии с $\alpha = 0$; тогда $\Delta p = \sqrt{\hbar m \omega / 2}$, $\Delta x = \sqrt{\hbar / 2 m \omega}$ и $\Delta p \Delta x = \hbar / 2$. Можно сказать, что состояние $|0\rangle$ было размазано в окрестности начала координат фазовой плоскости и занимало площадь \hbar . Эволюция во времени Ψ_t является тоже когерентным состоянием, находящимся в точке $\alpha_t = \alpha(t) = x_0 \delta(t) / \sqrt{2}$ с $\Delta p = \sqrt{\hbar m \omega / 2}$, $\Delta x = \sqrt{\hbar / 2 m \omega}$ и $\Delta p \Delta x = \hbar / 2$ и занимающим ту же площадь в фазовом пространстве. Наглядно ясно, что пакеты будут сильно перекрыты, если эти окрестности пересекаются. Естественно считать, что состояния разрешены, если эти окрестности не пересекаются. При $|\delta x_0| \gg 1$ и $t > \tau$ окрестности заведомо не пересекаются и осциллятор находится в квазиклассическом состоянии со средней энергией $E_t \gg \Delta E$ (см. (3.36)). Очевидно, что

$$|\delta E| = 1/2 \hbar \omega x_0^2 \delta \delta^* \gg \Delta E = \hbar \omega \sqrt{x_0^2 / 2}, \quad (3.39)$$

т. е. конечное состояние осциллятора может быть по измерению энергии разрешено от начального основного состояния.

§ 4. Линейные адиабатические инварианты и когерентные состояния

В предыдущих параграфах был рассмотрен вопрос о построении генераторов группы динамической симметрии квантовой системы из интегралов движения, чьи собственные значения определяют начальные координаты и импульсы в фазовом пространстве средних координат и импульсов. В настоящем параграфе будет рассмотрен другой аспект таких интегралов движения, с помощью которых строятся когерентные состояния. А именно будет обсуждена связь этих точных интегралов движения с адиабатическими инвариантами. Хорошо известными примерами адиабатических инвариантов являются магнитный момент заряженной частицы, движущейся в медленно меняющемся (по сравнению с радиусом классической орбиты) по пространству и (по сравнению с периодом обращения по этой орбите) по времени магнитном поле [150], а также отношение энергии осциллятора к частоте в случае зависимости частоты от времени. Адиабатическим инвариантам посвящено большое количество работ [151—154]. В точной формулировке адиабатической инвариантности вводится параметр T (масштаб времени) такой, что при $T \rightarrow \infty$ (т. е. $1/T \rightarrow 0$) внешние параметры, зависящие от времени (массы, электрические и магнитные поля и т. д.), имеют бесконечно уменьшающуюся скорость изменения. Если имеется положительная константа M такая, что для изменения ΔI числа I для всех достаточно больших I выполняется неравенство $|\Delta I| < M/T^n$ (n — положительное целое число), то говорят, что I является адиабатическим инвариантом порядка n . Постоянство магнитного момента с точностью до первого порядка по параметру малости было впервые получено Альфвеном (см. [150]). Позднее Крускал [154] доказал это свойство с точностью до всех порядков в некоторых частных случаях полей.

Курслрудом [151] была доказана адиабатическая инвариантность для одномерного классического осциллятора с переменной частотой с помощью использования линейности классического уравнения движения. Лепард [152] расширил этот результат на нелинейный осциллятор. Адиабатическая инвариантность в квантовой механике была доказана в первом порядке по параметру малости Борном и Фоком [155] для квантовых систем с невырожденным спектром энергий. Справедливость теоремы Борна — Фока с точностью до всех порядков была доказана в [153] для систем с конечным числом невырожденных уровней энергии, не пересекающихся в процессе адиабатического изменения параметров. В работе [91] рассматривался в адиабатическом приближении квантовый осциллятор с переменной частотой, была показана экспоненциальная малость амплитуд переходов между уровнями энергии. В настоящем параграфе будет продемонстрирована справедливость теоремы Борна — Фока для квантовых систем с

бесконечным числом вырожденных уровней энергии и с бесконечным числом бесконечнократно вырожденных уровней энергии. Рассмотрение квантовых систем и наличия адиабатических инвариантов для них будет проведено на основе исследования точных инвариантов. Кратко идея этого рассмотрения такова. Как говорилось выше, каждая квантовая система с n степенями свободы имеет $2n$ точных инвариантов, собственные значения которых дают начальные точки в фазовом пространстве средних координат и импульсов системы, а собственные векторы являются когерентными состояниями. Такие точные инварианты могут быть разложены в ряды по параметру малости, характеризующему скорость изменения зависящих от времени параметров системы. Это разложение определит адиабатические инварианты, которые сохраняются лишь с определенной степенью точности относительно параметра адиабатичности. Функция Грина и амплитуды переходов между различными состояниями как когерентными, так и энергетическими могут быть разложены по параметру адиабатичности, давая соответствующие ответы в адиабатическом приближении. Из описанного подхода ясно, что число адиабатических инвариантов соответствует числу точных инвариантов, равному $2n$ для системы с n степенями свободы. Функция от адиабатических инвариантов сама является адиабатическим инвариантом.

Рассмотренные в предыдущих главах важные квантовые системы (осциллятор с переменной частотой, электрон в переменном магнитном поле) описываются с помощью функции $\varepsilon(t)$, подчиняющейся классическому уравнению колебаний с переменной частотой. Если частота меняется медленно ($\dot{\omega}/\omega^2 \ll 1$), это уравнение можно решать с помощью метода последовательных приближений. Если ввести параметр T согласно формуле $t = T/\tau$, то (см. подробный вывод также в [151]) уравнение для $\varepsilon(\tau)$ примет вид

$$T^{-2} \frac{d^2 \varepsilon}{d\tau^2} + \omega^2(\tau) \varepsilon = 0. \quad (4.1)$$

Можно искать решения этого уравнения в виде

$$\varepsilon(\tau) = W \sin \left(T \int S(\tau') d\tau' \right). \quad (4.2)$$

Здесь W и S — медленно меняющиеся неизвестные функции τ . Тогда

$$\varepsilon'(\tau) = W' \sin \left(T \int S(\tau') d\tau' \right) + TSW \cos \left(T \int S(\tau') d\tau' \right); \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon''(\tau) = (W'' - T^2 S^2 W) \sin \left(T \int S(\tau') d\tau' \right) + (2TSW' + TS'W) \times \\ \times \cos \left(T \int S(\tau') d\tau' \right). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Уравнение (4.1) приводит к соотношениям

$$W''/T^2 - WS^2 + \omega^2(\tau)W = 0; \quad 2W'S + WS' = 0. \quad (4.5)$$

Отсюда видно, что $W^2S = \text{const}$, например, $S = 1/W^2$.

Можно представить функции W и S в виде асимптотических рядов по параметру $1/T$:

$$\begin{aligned} S &= S_0 + S_1/T + S_2/T^2 + \dots; \\ W &= W_0 + W_1/T + W_2/T^2 + \dots \end{aligned} \quad (4.6)$$

Подставляя эти ряды в (4.5) и приравнивая члены одного порядка по $1/T$, имеем

$$S_0 = \omega; \quad W_0 = 1/\sqrt{\omega}. \quad (4.7)$$

Кроме того, имеют место соотношения

$$W''_{n-2} - W_{n-2}(S^2)_2 - W_{n-4}(S^2)_4 - \dots - W_0(S^2)_n = 0; \quad (4.8)$$

$$(W^2)_n S_0 + (W^2)_{n-2} S_2 + \dots + (W^2)_0 S_n = 0. \quad (4.9)$$

Здесь введены обозначения

$$\begin{aligned} (S^2)_m &= S_m S_0 + S_{m-2} S_2 + \dots + S_0 S_m; \\ (W^2)_m &= W_m W_0 + W_{m-2} W_2 + \dots + W_0 W_m. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Нечетные члены S_{2k+1} , W_{2k+1} равны нулю. Величины W_n и S_n зависят от частоты ω и ее первых производных. Решение уравнения для функции ε эквивалентно нахождению решения уравнения

для ρ , где $\varepsilon = \rho(\tau) \exp\left(iT \int S(\tau') d\tau'\right)$; $S \equiv t/\rho^2$. Льюис [89] нашел функции ρ_n (W_n) до шестого порядка. Приведем их с точностью до четвертого порядка:

$$\rho_0 = (\sqrt{\omega})^{-1}; \quad \rho_2 = \frac{1}{8} \omega^{-7/2} \omega^{(2)} - \frac{3}{16} \omega^{-9/2} (\omega^{(1)})^2;$$

$$\begin{aligned} \rho_4 = & -\frac{1}{32} \omega^{-11/2} \omega^{(4)} + \frac{5}{16} \omega^{-13/2} \omega^{(3)} \omega^{(1)} - \frac{207}{128} \omega^{-15/2} \omega^{(2)} (\omega^{(1)})^2 + \\ & + \frac{29}{128} \omega^{-17/2} \omega^{(2)2} + \frac{621}{512} \omega^{-17/2} \omega^{(1)4}; \quad \omega^{(n)} = \frac{d^n \omega}{d\tau^n}. \end{aligned}$$

Для заряженной частицы с гамильтонианом $\mathcal{H} = (2M)^{-1} [(p_x - eA_x)^2 + (p_y - eA_y)^2] + e\varphi$, $\mathbf{A} = [\mathbf{H}(t) \times \mathbf{r}]/2$, $\varphi = \chi(t)(x^2 + y^2)$, точные линейные инварианты, как было показано в [72], имеют вид

$$A_1(t) = \frac{1}{2\sqrt{e}} \exp\left(\frac{i}{2} \int \omega(\tau) d\tau\right) [\varepsilon(p_x + ip_y) - iM\dot{\varepsilon}(y - ix)];$$

$$A_2(t) = \frac{1}{2\sqrt{e}} \exp\left(-\frac{i}{2} \int \omega(\tau) d\tau\right) [\varepsilon(p_y + ip_x) - iM\dot{\varepsilon}(x - iy)],$$

где $\ddot{\epsilon} + \Omega^2 \epsilon = 0$, $\Omega^2 = \omega^2/4 + (e^2/M^2)\chi(t)$. Эти точные инварианты можно представить в виде асимптотического ряда

$$A_i(\tau) = A_i^{(0)}(\tau) + \frac{1}{T} A_i^{(1)}(\tau) + \dots \quad (4.11)$$

Сумма первых n членов дает адиабатический инвариант n -го порядка

$$A_i^{[n]} = A_i^{(0)} + \frac{1}{T} A_i^{(1)} + \dots + \frac{1}{T^{n-1}} A_i^{(n-1)}; \quad \frac{dA_i^{[n]}}{dt} = O\left(\frac{1}{T^n}\right). \quad (4.12)$$

Мы выразили точный инвариант через решение $\epsilon(t)$. Чтобы получить ряд (4.11), нужно подставить в точное выражение асимптотический ряд для функции $\epsilon(t)$. Нулевое приближение для функции $\epsilon(t)$ имеет вид $\epsilon_0(t) = (M\Omega/e)^{1/2} \exp\left(i \int^t \Omega dt\right)$; с ее помощью можно получить два линейных по операторам координат и импульсов адиабатических инварианта нулевого порядка для частицы, движущейся в переменном электромагнитном поле:

$$A_1^0(\tau) = \frac{1}{2\sqrt{e}} \exp\left[iT \int^{\tau} \left[\frac{1}{2}\omega(\tau') + \Omega(\tau')\right] d\tau'\right] \times \\ \times \left[\frac{1}{\sqrt{\Omega}}(p_x + ip_y) + M\sqrt{\Omega}(y - ix)\right]; \quad (4.13)$$

$$A_2^0(\tau) = \frac{1}{2\sqrt{e}} \exp\left[iT \int^{\tau} \left[\frac{1}{2}\omega(\tau') + \Omega(\tau')\right] d\tau'\right] \times \\ \times \left[\frac{1}{\sqrt{\Omega}}(p_y + ip_x) + M\sqrt{\Omega}(x - iy)\right].$$

Пусть электромагнитное поле постоянно при $t \leq 0$ и при $t \rightarrow \infty$. Это означает, что в уравнении для функции ϵ имеют место соотношения $\Omega(t \leq 0) = \Omega_{in}$, $\Omega(t \rightarrow \infty) = \Omega_f$, где Ω_{in} и Ω_f — постоянные частоты. Точные начальные условия задаются формулами $\epsilon(t) = \Omega^{-1/2} \exp(i\Omega_{in}t)$ и $\dot{\epsilon} = i\Omega\epsilon$. Таким образом, можно получить формулы для амплитуд и вероятностей переходов из начального $|\text{in}\rangle$ состояния в конечное $|\text{f}\rangle$, а также вычислить изменение адиабатических инвариантов. Точные формулы для амплитуд переходов и изменения адиабатических инвариантов получены в работе [76].

Найдем эти величины в адиабатическом приближении, т. е. определим асимптотические разложения точных формул по параметру $1/T$. Из формул (4.6) вытекает, что

$$\epsilon(\infty) = \epsilon_0 + \epsilon_{n+2}/T^{n+2} + \dots, \quad (4.14)$$

где n — число непрерывных производных функций $\Omega(t)$ (разложение асимптотическое), т. е. число непрерывных производных

электромагнитного потенциала. Значение ε_{n+2} определяется изменением $(n+1)$ -й производной функции $\Omega(t)$. Подставляя формулу (4.14) в формулу для точных интегралов движения, получаем

$$\begin{aligned} A_1(\infty) &= A_{1,0} + A_{1,n+1}/T^{n+1}, \\ A_2(\infty) &= A_{2,0} + A_{2,n+1}/T^{n+1}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

где $A_{1,0}$ и $A_{2,0}$ являются адиабатическими инвариантами при $t \rightarrow \infty$. Формулы (4.15) показывают, что изменение адиабатических инвариантов $A_{1,0}$ и $A_{2,0}$ пропорционально $1/T^{n+1}$. Это означает, что адиабатические инварианты сохраняются с точностью до членов порядка $1/T^{n+1}$. Этот результат получается, если построить асимптотическое разложение точной формулы для изменения адиабатических инвариантов $A_{1,0}$ и $A_{2,0}$ по параметру $1/T$. Все формулы для переходов выражаются через комплексные константы ξ и η ($|\xi|^2 - |\eta|^2 = 1$). Точное решение уравнения для $\varepsilon(t)$ при $t \rightarrow \infty$ имеет вид

$$\varepsilon(\infty) = (M\Omega_f/e)^{-1/2} (\xi e^{i\Omega_f t} - i\eta e^{-i\Omega_f t}).$$

Если разложить ξ и η по параметру $1/T$, то из разложения для ε (4.14) следует

$$\xi = \xi_0 + \xi_{n+1}/T^{n+1}; \quad \eta = \eta_{n+1}/T^{n+1}. \quad (4.16)$$

Здесь $\xi_0 = \exp\left(i \int^t \left(\Omega - \frac{\omega_f}{2}\right) dt'\right)$. Значение $i \frac{\eta}{\xi^*}$ играет роль амплитуды отражения от одномерного барьера, определяемой функцией $\Omega(t)$. Таким образом, коэффициент отражения есть величина порядка $1/T^{2(n+1)}$. Если подставить в точную формулу изменения адиабатических инвариантов асимптотическое разложение (4.16), то мы получим, что линейные инварианты сохраняются с точностью до $1/T^{n+1}$. Получим изменение адиабатических инвариантов по когерентным состояниям. Разность значений операторов определяется следующим образом:

$$\Delta A_k = \frac{\langle t \rightarrow \infty | A_k^f | t \rightarrow \infty \rangle - \langle \text{in} | A_k^{\text{in}} | \text{in} \rangle}{\langle \text{in} | A_k^{\text{in}} | \text{in} \rangle}, \quad (4.17)$$

где $|t \rightarrow \infty\rangle$ есть предел при $t \rightarrow \infty$ начального состояния $|\text{in}\rangle$.

Значения ΔA_k легко вычисляются, если использовать связь точных инвариантов с конечными. В результате в случае когерентных состояний $|\alpha, \beta\rangle$ имеем следующие изменения адиабатических инвариантов $A_{1,0}$, $A_{2,0}$:

$$\begin{aligned} \Delta A_{1,0} &= -1 + \left(\xi^* - \frac{\eta\beta^*}{\alpha}\right) \exp\left[i \int^t \left(\Omega - \frac{\omega_f}{2}\right) dt\right]; \\ \Delta A_{2,0} &= -1 + \left(\xi^* - \frac{\eta\alpha^*}{\beta}\right) \exp\left[i \int^t \left(\Omega - \frac{\omega_f}{2}\right) dt\right]. \end{aligned} \quad (4.18)$$

В адиабатическом пределе η стремится к нулю; разности $\Delta A_{1,0}$ и $\Delta A_{2,0}$ также стремятся к нулю. Если в эти формулы подставить разложение (4.16), найдем

$$\Delta A_{i,0} = O(1/T^{n+1}), \quad i = 1, 2. \quad (4.19)$$

Получим теперь изменения квадратичных адиабатических инвариантов $A_1^\dagger A_1$ и $A_2^\dagger A_2$, соответствующих точным квадратичным инвариантам. Их эволюция может быть легко рассчитана так же, как и для линейного случая. Для когерентных состояний имеем

$$\begin{aligned} \Delta A_1^\dagger A_1 &= |\eta|^2 \frac{|\alpha|^2 + |\beta|^2 + 1}{|\alpha|^2} - 2\operatorname{Re}\left(\xi\eta \frac{\beta^*}{\alpha}\right); \\ \Delta A_2^\dagger A_2 &= |\eta|^2 \frac{|\alpha|^2 + |\beta|^2 + 1}{|\alpha|^2} - 2\operatorname{Re}\left(\xi\eta \frac{\alpha^*}{\beta}\right). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Для случая уровней Ландау с заданными значениями энергии и проекции момента имеем

$$\Delta A_1^\dagger A_1 = |\eta|^2 \frac{n_1 + n_2 + 1}{n_1}; \quad \Delta A_2^\dagger A_2 = |\eta|^2 \frac{n_1 + n_2 + 1}{n_2}. \quad (4.21)$$

В адиабатическом пределе ($\eta = 0$) все эти изменения равны нулю для любых начальных состояний. Интересно рассмотреть квантовый оператор, соответствующий классическому адиабатическому инварианту p_i^2/H или E/ω :

$$I_0 = A_{1,0}^\dagger A_{1,0} + 1/2. \quad (4.22)$$

Изменение этого инварианта легко вычисляется:

$$\Delta I = 2|\eta|^2 \frac{n_1 + n_2 + 1}{2n_1 + 1}. \quad (4.23)$$

Вследствие (4.16) сохранение величины I_0 выполняется с точностью порядка $1/T^{2(n+1)}$:

$$\Delta I_0 = O(1/T^{2(n+1)}). \quad (4.24)$$

Если частота Ω имеет производные всех порядков, то все адиабатические инварианты, линейные и квадратичные, сохраняются во всех порядках по параметру $1/T$. Это не означает точной инвариантности. Хороший пример, который часто приводится, — функция $\exp(-1/\lambda)$, для которой все производные при $\lambda = 0$ равны нулю. Здесь следует подчеркнуть, что сохранение адиабатических инвариантов во всех порядках по $1/T$ получено для системы с бесконечнократным вырождением уровней энергии, поскольку уровни Ландау вырождены по проекции момента на магнитное поле. Когда поля постоянны, гамильтониан заряда в магнитном поле выражается через операторы A_1, A_1^\dagger по формуле $\mathcal{H} = (A_1^\dagger A_1 + 1/2)$.

Рассмотрим теперь разложение амплитуд перехода по параметру $1/T$. Точная формула получена нами ранее и обсуждалась в [72, 76]. Все амплитуды суть функции двух комплексных параметров ξ и η , а вероятность перехода зависит от одного действительного параметра $R = |\eta/\xi|^2$, который можно трактовать как коэффициент отражения от потенциального барьера, задаваемого функцией $\Omega(t)$. Сначала найдем разложение точных амплитуд по параметру $|\eta/\xi|$:

$$\langle \gamma, \delta; f | \alpha, \beta; t \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} B_m(\alpha, \beta, \gamma^*, \delta^*) |\eta/\xi|^m, \quad (4.25)$$

где

$$B_m = \frac{1}{m!} \left[\frac{\partial^m}{\partial r^m} \langle \gamma, \delta; f | \alpha, \beta; i\eta \rangle \right]_{r=|\eta/\xi|} = 0,$$

и

$$\langle m_1, m_2; f | n_1, n_2; t \rangle = \sum_{m=0}^{\infty} A_m(m_1, m_2, n_1, n_2) |\eta/\xi|^m, \quad (4.26)$$

где

$$A_m = (n_1! n_2! m_1! m_2!)^{-1/2} \left[\frac{\partial^{n_1+n_2+m_1+m_2}}{\partial \alpha^{n_1} \partial \beta^{n_2} \partial \gamma^{*m_1} \partial \delta^{*m_2}} \times \right. \\ \left. \times \exp \left(-\frac{1}{2} |\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 \right) B_m \right]_{\alpha=\beta=\gamma=\delta} = 0.$$

Для вероятности перехода $|\langle m_1, m_2; f | n_1, n_2; t \rangle|^2$ разложение по параметру $R = |\eta/\xi|^2$ дано в [72]. Первый член разложения вероятности остаться в том же состоянии $|n_1, n_2\rangle$ имеет вид

$$|\langle n_1, n_2; f | n_1, n_2; t \rangle|^2 = 1 - (2n_1n_2 + n_1 + n_2) R + \dots \quad (4.27)$$

Можно получить асимптотические разложения по параметру $1/T$, подставляя формулы (4.16) для функций ξ и η в формулы для амплитуд переходов (4.25) и (4.26). Видно, что $|\eta/\xi| \sim 1/T^{n+1}$ и коэффициент $R \sim 1/T^{2(n+1)}$. Формула (4.27) показывает, что вероятность перехода $|\langle i\eta | f \rangle|^2$ есть величина порядка $1/T^{2(n+1)}$. Это означает, что адиабатическая инвариантность выполняется с такой точностью. Если электромагнитное поле задается функцией, которая имеет производные по времени всех порядков, то адиабатическая инвариантность сохраняется для заряженной частицы, движущейся в этом поле, во всех порядках по параметру адиабатичности $1/T$.

Обсудим теперь случай общей квадратичной системы и физический смысл введенных линейных адиабатических инвариантов. В случае общей квадратичной системы были построены $2n$ точных линейных интегралов движения, удовлетворяющих соотношениям коммутации бозонных операторов рождения и уничтожения (см. формулу (4.2) гл. III). Решения волнового уравнения, амплитуды переходов и функция Грина были выражены через зависящие от времени матричные элементы матрицы $\Lambda(t)$ и вектор $\delta(t)$ (см.

(4.3) гл. III). Матрица Λ удовлетворяет матричному уравнению первого порядка $\dot{\Lambda} = i\Lambda\sigma_2(B + B^*)$, где матрица $B + B^*$ зависит от времени. Если зависимость от времени матрицы $B + B^*$ мала, то можно решать это уравнение методом итераций. Подставляя приближенные решения в точные линейные инварианты, мы будем получать адиабатические линейные инварианты. В случае общей квантовой системы с n степенями свободы мы имеем $2n$ точных инвариантов, отвечающих начальным точкам траектории в фазовом пространстве $x_{in} = UxU^{-1}$ и $p_{in} = UpU^{-1}$, где U — оператор эволюции (или функция Грина) — зависит от медленно меняющихся параметров квантовой системы. Разлагая функцию Грина по параметру адиабатичности, как это делалось для обсуждаемых систем, мы будем получать соответствующие адиабатические инварианты. Их физический смысл легко понять с помощью решений классических уравнений Гамильтона — Якоби $q_i(q_0, p_0, t, \lambda(t)), p_i(q_0, p_0, t, \lambda(t))$. Пусть эти соотношения разрешены относительно начальной точки в фазовом пространстве. Тогда интегралы движения q_0, p_0 зависят от величин $q(t), p(t)$ и параметра $\lambda(t)$. Точная траектория, начинающаяся в точке (q_0, p_0) , может быть аппроксимирована приближенной траекторией, причем эти траектории совпадают друг с другом при стремлении параметра адиабатичности к нулю. Сказанное, разумеется, относится и к тем случаям, когда гамильтониан квантовой или классической системы зависит от нескольких переменных параметров, причем один из параметров меняется медленно. Тогда переходы между построенными в § 1 данной главы состояниями $|n, t\rangle$ при стремлении параметра адиабатичности к нулю определяются U -матрицей такой, что $U_{mn} = \delta_{mn}$. Таким образом, существуют $2N$ адиабатических инвариантов, отвечающих точным инвариантам — начальным точкам траектории в фазовом пространстве. Другие адиабатические инварианты, например квадратичные (типа E/ω), строятся разложением точных, квадратичных по параметру адиабатичности инвариантов. Линейные адиабатические инварианты связаны поэтому с когерентными состояниями квантовых систем, также строящихся как собственные функции точных инвариантов — начальных точек (q_0, p_0) .

§ 1. Квазиэнергия и квазиэнергетические состояния квантовых систем с периодически изменяющимися параметрами

Рассмотрим систему, гамильтониан которой является периодической функцией времени: $\mathcal{H}(t + T) = \mathcal{H}(t)$. Примерами таких систем являются стационарные системы, взаимодействующие с сильным периодическим внешним полем, как, например, атомы, молекулы, кристаллы в поле лазерного излучения. Волновые функции Ψ нестационарной системы удовлетворяют уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathcal{H} \Psi. \quad (1.1)$$

Оператор эволюции $U(t)$ этого уравнения — временная функция Грина — является решением операторного уравнения с начальным условием $U(0) = E$:

$$i\hbar \frac{dU}{dt} = \mathcal{H}U. \quad (1.2)$$

В силу периодичности по времени гамильтониана \mathcal{H} система обладает дискретной группой симметрии, состоящей из преобразований вида $t \rightarrow t + nT$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Периодичность гамильтониана (1.1) приводит к соотношению

$$U(t + T) = U(t) U(T). \quad (1.3)$$

Ясно, что с помощью оператора эволюции $U(t)$ можно построить представление этой дискретной группы, причем сдвигу $t \rightarrow t + nT$ будет отвечать оператор $U(nT)$. Из (1.3) следует, что произведению двух сдвигов $t \rightarrow t + nT$ и $t \rightarrow t + mT$ отвечает снова сдвиг $t \rightarrow t + (m + n)T$, т. е.

$$U(nT) U(mT) = U((m + n)T). \quad (1.4)$$

Оператор $U(T)$ является образующей этой дискретной группы: $U(nT) = [U(T)]^n$, и в математической литературе [157] $U(T)$ называется оператором монодромии.

В работе Никишова и Ритуса [158] были построены для релятивистской заряженной частицы, движущейся в поле плоской волны,

волновые функции, обладающие определенным четырехмерным квазиимпульсом, четвертая компонента которого была названа квазиэнергией. Волновые функции с определенной квазиэнергией использовались в работе [159] при рассмотрении процесса ионизации атома сильным периодическим полем.

В работах Зельдовича [160] и Ритуса [161] был выделен важный класс решений уравнения (1.1), названный квазиэнергетическими состояниями (КЭС). Волновые функции КЭС являются решениями (1.1) и, кроме того, удовлетворяют условию

$$\Psi_{\varepsilon}(t + T) = e^{-i\varepsilon T/\hbar} \Psi_{\varepsilon}(t). \quad (1.5)$$

Величина ε , входящая в (1.5), называется квазиэнергией (КЭ). Она определена с точностью до целого числа колебательных квантов $\varepsilon + p\hbar\Omega$, $\Omega = 2\pi/T$, $p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ В случае стационарного гамильтониана (период T произволен) решениями (1.5) являются стационарные состояния. Спектр КЭ переходит в энергетический спектр стационарной системы при $T \rightarrow \infty$, т. е. при $\Omega \rightarrow 0$.

В случае систем с конечным числом уровней уравнение Шредингера превращается в систему линейных дифференциальных уравнений с периодическими коэффициентами и спектр КЭ определяется с помощью собственных значений унитарной матрицы монодромии $U(T)$. Стационарные системы, обладающие близкими уровнями, например мультиплеты тонкой и сверхтонкой структуры в атомах, вращательно-колебательные спектры молекул [162—167], системы со случайным вырождением, такие, как атом водорода [168—170], и другие, взаимодействующие с сильным периодическим внешним полем, обычно аппроксимируются моделью с конечным числом уровней. Наиболее популярной является довольно грубая двухуровневая модель, в рамках которой рассматриваются только два уровня стационарной системы E_2 и E_1 , помещенной в резонансное внешнее поле с частотой $\Omega = (E_2 - E_1)/\hbar$. Обзор результатов, полученных в рамках этой модели, и сравнение их с экспериментом приведены в работе [178].

Характер спектра излучения, возникающего при переходах между КЭС, был впервые исследован Блохинцевым [171] при рассмотрении эффекта Штарка для атома водорода в переменном поле. В дальнейшем спектры излучения систем с конечным числом уровней, помещенных в периодическое внешнее поле, были подробно исследованы теоретически и экспериментально [172—175].

Применению метода квазиэнергий при рассмотрении процессов рассеяния и излучения квантовой системой, находящейся в сильном электромагнитном поле, посвящен обзор Зельдовича [176]. Метод квазиэнергий оказывается полезным при описании процессов многофотонной ионизации атомов периодическим внешним полем (см. обзоры [177—179]). Рассмотрению молекулярных систем методом квазиэнергий посвящены работы [180—182]. В ра-

боте [182] в квазиклассическом приближении находится спектр КЭ ангармонического осциллятора и исследуется явление нелинейного резонанса.

Спектр квазиэнергий найден точно для небольшого числа систем, таких, как, например, некоторые системы с конечным числом уровней [183, 184], осциллятор с периодически изменяющейся частотой [185, 186], релятивистский электрон в поле плоской волны [158], релятивистский электрон в суперпозиции полей плоской волны и постоянного магнитного поля [187]. В работе Бабица и Булдырева [188] при рассмотрении задачи дифракции фактически были найдены дискретный спектр КЭ и КЭС квадратичной системы с N степенями свободы и гамильтонианом специального вида. Спектр КЭ и КЭС для заряда, движущегося в поле волноводного типа, были найдены в работах [189, 190]. Многие из этих точно решаемых задач могут быть сведены к квантовомеханическим задачам о поведении многомерной системы с периодичным по времени и квадратичным по координатам и импульсам гамильтонианом, спектр КЭ и КЭС которой построены в [191].

Как указывалось в [176], КЭС являются собственными функциями оператора монодромии $U(T)$. В работе [167] было установлено, что временная эволюция собственных функций $\Psi_\varepsilon(0)$ оператора монодромии

$$U(T) \Psi_\varepsilon(0) = e^{-i\varepsilon T/\hbar} \Psi_\varepsilon(0) \quad (1.6)$$

порождает КЭС, т. е.

$$\Psi_\varepsilon(t) = U(t) \Psi_\varepsilon(0). \quad (1.7)$$

Доказательство этого утверждения сводится к проверке выполнения условий (1.1) и (1.5) для $\Psi_\varepsilon(t)$, определенной согласно (1.7). Условие (1.1) выполнено для волновой функции $\Psi_\varepsilon(t)$ (1.7) в силу (1.2), а выполнение (1.5) следует из (1.3) и (1.6):

$$\Psi_\varepsilon(t+T) = U(t+T) \Psi_\varepsilon(0) = U(t)U(T) \Psi_\varepsilon(0) = e^{-i\varepsilon T/\hbar} \Psi_\varepsilon(t). \quad (1.8)$$

В полном соответствии со случаем пространственных сдвигов находим

$$U(nT) \Psi_\varepsilon(t) = e^{-i\varepsilon nT/\hbar} \Psi_\varepsilon(t), \quad (1.9)$$

т. е. КЭС являются аналогами блоховских волновых функций. Таким образом, КЭС преобразуются по одномерному унитарному представлению дискретной группы временных сдвигов, характер $\chi_\varepsilon(n)$ которой задается величиной

$$\chi_\varepsilon(n) = \exp(-i\varepsilon nT/\hbar).$$

Отметим, что КЭС существуют только в том случае, когда временная функция Грина $U(t)$ является унитарным оператором при всех t и удовлетворяет соотношению (1.3).

§ 2. Интегралы движения системы с периодическим квадратичным гамильтонианом

В предыдущих главах были построены интегралы движения, функция Грина, когерентные и фоковские состояния нестационарной квантовой системы, гамильтониан которой представляет собой неоднородную квадратичную форму общего вида с коэффициентами — произвольными функциями времени. Важным случаем такой системы является квадратичная по операторам координат и импульсов система с коэффициентами — периодическими функциями времени с периодом T . Гамильтониан системы $\mathcal{H}(t)$ удовлетворяет условию $\mathcal{H}(t+T) = \mathcal{H}(t)$. У таких нестационарных систем, в силу инвариантности относительно сдвигов по времени на период T , существует спектр квазиэнергий (КЭ) и отвечающая этому спектру система квазиэнергетических состояний (КЭС). В явном виде КЭС и спектры КЭ найдены для небольшого числа простых квантовых систем, таких, как, например, заряженная частица в поле плоской волны [158], осциллятор с переменной частотой [185], заряженная частица в суперпозиции постоянного магнитного поля и плоской волны [187], системы с конечным числом уровней [183] (см. также обзор [176]). Дискретный спектр КЭ однородной квадратичной системы частного вида в связи с задачами дифракции был рассмотрен в [188]. В работах [189, 191] был проведен теоретико-групповой анализ представления группы динамической симметрии, на основе которой построены КЭС и спектр КЭ произвольной периодической квадратичной системы. Рассмотрим, следуя [191], систему с N степенями свободы, гамильтониан которой, используя обозначения (4.1) гл. III, запишем в виде ($\hbar = 1$)

$$\mathcal{H} = QB(t)Q + C(t)Q + H_0(t), \quad (2.1)$$

где $Q_i = p_i$ — импульсы, $Q_{N+i} = q_i$ — координаты, $i = 1, 2, \dots, N$.

Положим теперь, что вещественная симметрическая матрица $B(t)$, вещественный вектор $C(t)$ и функция $H_0(t)$ являются периодическими функциями времени:

$$B(t+T) = B(t); \quad C(t+T) = C(t); \quad H_0(t+T) = H_0(t). \quad (2.2)$$

Волновые функции состояний с определенной квазиэнергией ε удовлетворяют уравнению Шредингера с гамильтонианом (2.1)

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathcal{H} \Psi \quad (2.3)$$

и условию квазипериодичности во времени

$$\Psi(q, t+T) = e^{-i\varepsilon T} \Psi(q, t), \quad (2.4)$$

которое позволяет представить Ψ в виде

$$\Psi(q, t) = e^{-i\varepsilon t} u_\varepsilon(q, t),$$

где $u_\varepsilon(q, t + T) = u_\varepsilon(q, t)$. Величина ε , как указывалось выше, определена с точностью до аддитивной добавки энергии целого числа колебательных квантов:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + n\omega, \quad \omega = 2\pi/T, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

С гамильтонианом (2.1), как было показано в гл. III, можно связать, как и в классическом случае, $2N$ эрмитовых, явно зависящих от времени интегралов движения $I_\lambda(t)$, удовлетворяющих уравнению

$$\partial I_\lambda / \partial t + i[\mathcal{H}, I_\lambda] = 0, \quad \lambda = 1, 2, \dots, 2N. \quad (2.5)$$

Решение системы (2.5) запишем в виде

$$I_\lambda = \Lambda_{\lambda\mu}(t) Q_\mu + \delta_\lambda(t), \quad (2.6)$$

где вещественные матрица $\Lambda_{\lambda\mu}$ и вектор δ_λ удовлетворяют системе уравнений (см. (4.2), (4.3) гл. III)

$$\frac{d}{dt} \Lambda = 2\Lambda \Sigma B; \quad \frac{d}{dt} \delta = \Lambda \Sigma C \quad (2.7)$$

и условиям

$$\Lambda(0) = E; \quad \delta(T) = \Lambda(T) \delta(0). \quad (2.8)$$

Матрица Λ является симплектической: $\Lambda \Sigma \tilde{\Lambda} = \Sigma$ (см. (5.33) гл. III), а интегралы движения (2.4) подчиняются каноническим коммутационным соотношениям

$$[I_\lambda(t), I_\mu(t)] = -i\Sigma_{\lambda\mu}. \quad (2.9)$$

В силу условий периодичности (2.2) гамильтониана \mathcal{H} , матрица Λ удовлетворяет соотношению

$$\Lambda(t + T) = \Lambda(T) \Lambda(t). \quad (2.10)$$

Матрица $\Lambda(T)$ в математической литературе называется матрицей монодромии [157]. Она определяет спектр КЭ системы. Очевидно, что ввиду (2.8) и (2.10) интегралы движения I_λ связаны соотношением

$$I(t + T) = \Lambda(T) I(t). \quad (2.11)$$

Отметим, что если среди решений $\delta(t)$ системы (2.5) не существует решения, удовлетворяющего условию (2.6), то среди решений уравнения Шредингера нет КЭС. Это означает, что квантовая система находится в резонансных условиях, когда существен учет в гамильтониане системы наряду с квадратичными и ангармоническими членами. Для нахождения спектра КЭ исследуем теоретико-групповую структуру преобразования $\Lambda(T)$.

Совершенно очевидно, что выбором подходящего симплектического преобразования l матрицу монодромии $\Lambda(T)$ можно привести к некоторой стандартной форме $\Lambda'(T)$:

$$\Lambda(T) = l \Lambda'(T) l^{-1}, \quad (2.12)$$

В случае комплексных симплектических преобразований l в качестве $\Lambda'(T)$ можно взять жорданову форму матрицы $\Lambda(T)$. Преобразование (2.12) по матрице $\Lambda(T)$ определяет в симплектической группе класс сопряженных элементов $\Lambda' = l^{-1}\Lambda(T)l$, когда l пробегает всю группу $\text{Sp}(2N, R)$.

Рассмотрим простейший случай, когда матрица $\Lambda(T)$ может быть приведена к диагональному виду с помощью, вообще говоря, комплексного симплектического преобразования l . Тогда матрица $\Lambda(T)$ сопряжена элементу некоторой картановской подгруппы в $\text{Sp}(2N, R)$. В работе [192] были найдены все картановские подалгебры вещественных полупростых алгебр Ли. Для группы $\text{Sp}(2N, R)$ (тип с. 1) в [192] показано, что в случае четного N имеется $(N+2)^2/4$ различных картановских подалгебр, а в случае N нечетного — $(N+1)(N+3)/4$. Каждая картановская подгруппа $\Lambda_{(K,l)} = \exp h^{(K,l)}$, соответствующая картановской подалгебре $h^{(K,l)}$, задается двумя целыми числами K, l ($K \geq 0, l \geq 0, K+2l \leq N$).

Матрица $h^{(K,l)}$ имеет блочный вид:

$$h^{(K,l)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & a_K & 0 & 0 \\ 0 & 3_l & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 \\ -a_K & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -b_l & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -c \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

где блоки равны

$$a_K = \begin{pmatrix} h_1 & & & 0 \\ & h_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & h_K \end{pmatrix}; \quad b_l = \begin{pmatrix} b^{(1)} & & & 0 \\ & b^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & b^{(l)} \end{pmatrix};$$

$$c = \begin{pmatrix} h_{K+2l+1} & & & & 0 \\ & h_{K+2l+2} & & & \\ & & \ddots & & \\ 0 & & & & h_N \end{pmatrix}; \quad b^{(r)} = \begin{pmatrix} h_{K+l+r} & -h_{K+r} \\ h_{K+r} & h_{K+l+r} \end{pmatrix};$$

h_i — вещественные числа ($i = 1, 2, \dots, N$).

Матрица $\Lambda_{(K,l)} = \exp h^{(K,l)}$ имеет $2K$ собственных значений вида $\lambda_m = e^{\pm ih_m}$ ($m = 1, 2, \dots, K$), лежащих на единичной окружности; $2(N-K-2l)$ вещественных собственных значений вида $\lambda_j = e^{\pm h_j}$ ($K+2l+1 \leq j \leq N$) и $4l$ комплексных собственных значений вида $\lambda_r = \exp(\pm ih_{K+r} \pm h_{K+l+r})$ ($r = 1, 2, \dots, l$). Таким образом, в случае, когда все собственные значения матрицы $\Lambda(T)$ различны, можно преобразованием (2.12) привести

матрицу $\Lambda(T)$ к стандартному виду:

$$\Lambda'(T) = l_{\Lambda}^{-1} \Lambda(T) l_{\Lambda} = \exp h^{(K, l)}, \quad (2.14)$$

где $h^{(K, l)}$ дается (2.13), причем матрица l_{Λ} определена с точностью до правого множителя $\Lambda_{(K, l)}$, который является произвольным элементом картановской подгруппы $\Lambda_{(K, l)} = \exp h^{(K, l)}$, определяющей симметрию задачи.

§ 3. Линейное каноническое преобразование

Рассмотрим линейное неоднородное преобразование от канонических импульсов p и координат q к новым канонически сопряженным импульсам \tilde{p} и координатам \tilde{q} вида $Q = l\tilde{Q} + d$, т. е.

$$\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_1 & l_2 \\ l_3 & l_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{p} \\ \tilde{q} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

где l — вещественная симплектическая матрица размером $2N \times 2N$, $d = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}$ — вещественный $2N$ -мерный вектор. В силу условия симплектичности матрицы l :

$$l\Sigma\tilde{l} = \Sigma, \quad \text{где} \quad \Sigma = \begin{pmatrix} 0 & -E_N \\ E_N & 0 \end{pmatrix},$$

преобразование (3.1) оказывается каноническим, т. е. сохраняющим коммутационные соотношения

$$\begin{aligned} [p_i, p_j] &= [q_i, q_j] = 0; & [\tilde{p}_i, \tilde{p}_j] &= [\tilde{q}_i, \tilde{q}_j] = 0; \\ [p_i, q_j] &= -i\delta_{ij}; & [\tilde{p}_i, \tilde{q}_j] &= -i\delta_{ij} \quad (i = 1, 2, \dots, N). \end{aligned} \quad (3.2)$$

Подставляя (3.1) в (3.2), получаем соотношения между матрицами l_i , являющиеся следствием симплектичности l :

$$\tilde{l}_1 l_4 - \tilde{l}_2 l_3 = E_N; \quad \tilde{l}_3 l_4 = \tilde{l}_4 l_3; \quad \tilde{l}_1 l_2 = \tilde{l}_2 l_1; \quad \tilde{l}_4 l_1 - \tilde{l}_3 l_2 = E_N. \quad (3.3)$$

Каноническому преобразованию (3.1) отвечает порождающий его унитарный оператор U_l , $U_l^\dagger U_l = E$, такой, что

$$p = U_l \tilde{p} U_l^\dagger, \quad q = U_l \tilde{q} U_l^\dagger. \quad (3.4)$$

Для нахождения ядра $\langle \tilde{q} | U_l | q \rangle$ преобразования U_l полезно рассмотреть соответствующее ему классическое каноническое преобразование. Будем теперь считать входящие в (3.1) координаты и импульсы не операторами, а c -числами. Перестановочные соотношения (3.2) перейдут в условия каноничности классического преобразования (3.1) путем замены в (3.2) коммутаторов

$[f, g]$ на скобки Пуассона $\{f, g\}_P = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} \right)$ по обычному правилу: $[f, g] \rightarrow -i \{f, g\}_P$.

Классическому каноническому преобразованию (3.1) отвечает в переменных q, \tilde{q} производящая функция $F(q, \tilde{q})$, позволяющая находить импульсы p и \tilde{p} :

$$p = \partial F / \partial q, \quad \tilde{p} = -\partial F / \partial \tilde{q}. \quad (3.5)$$

Условия каноничности преобразований (3.1) и (3.4) можно записать в виде

$$p dq = \tilde{p} d\tilde{q} + dF. \quad (3.6)$$

Для существования F в переменных q, \tilde{q} достаточно, чтобы гессиан $\text{Hess } F \equiv \det \|\partial^2 F / \partial q \partial \tilde{q}\|$ был отличен от нуля. Пусть $\det l_3 \neq 0$, тогда (3.1) можно разрешить относительно p и \tilde{p} ; с учетом (3.3) находим

$$p = l_1 l_3^{-1} q - l_3^{-1} \tilde{q} + d_1; \quad \tilde{p} = l_3^{-1} q - l_3^{-1} l_4 \tilde{q} - l_3^{-1} d_2. \quad (3.7)$$

Подставляя (3.7) в (3.6), получаем для производящей функции $F(q, \tilde{q})$ уравнение в полных дифференциалах, причем условия совместности уравнения (3.6) выполнены ввиду тождеств (3.3). Интегрируя уравнение (3.6), находим

$$F(q, \tilde{q}) = \frac{1}{2} q l_1 l_3^{-1} q + \frac{1}{2} \tilde{q} l_3^{-1} l_4 \tilde{q} - \tilde{q} l_3^{-1} q + \tilde{q} l_3^{-1} d_2 + q d_1 - q l_1 l_3^{-1} d_2. \quad (3.8)$$

Отметим, что $\text{Hess } F = \det \|\partial^2 F / \partial q \partial \tilde{q}\| = \det l_3^{-1} \neq 0$.

Для нахождения явного вида ядра $\langle \tilde{q} | U_l | q \rangle$ квантового преобразования (3.1) следует использовать систему уравнений (3.4), которая в представлении, где \tilde{q} диагональны, принимает с учетом (3.3) и (3.7) вид

$$\begin{aligned} -i \frac{\partial}{\partial \tilde{q}} \langle \tilde{q} | U_l | q \rangle &= (l_3^{-1} q - l_3 l_4 \tilde{q} - l_3^{-1} d_2) \langle \tilde{q} | U_l | q \rangle; \\ i \frac{\partial}{\partial q} \langle \tilde{q} | U_l | q \rangle &= (l_1 l_3^{-1} q - l_3^{-1} \tilde{q} - l_1 l_3^{-1} d_2 + d_1) \langle \tilde{q} | U_l | q \rangle. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Ясно, что при подстановке $\langle \tilde{q} | U_l | q \rangle = c \exp \{-iF(q, \tilde{q})\}$ система (3.9) переходит, с учетом (3.7), в систему (3.5). Условие унитарности ядра $\langle \tilde{q} | U_l | q \rangle$ позволяет определить нормировочную константу c , квадрат которой равен якобиану перехода от координат (p, q) к (\tilde{q}, q) , деленному на плотность состояний $(2\pi)^N$ в фазовом пространстве. Таким образом, получаем

$$\langle \tilde{q} | U_l | q \rangle = \left(\frac{\text{Hess } F}{(2\pi)^N} \right)^{1/2} \exp[-iF(q, \tilde{q})], \quad (3.10)$$

где $F(q, \tilde{q})$ дается (3.8), а $\text{Hess } F = \det l_3^{-1}$.

В вырожденном случае, когда $\det l_3 = 0$, необходимо рассмотреть, аналогично вышеизложенному, ядро U_l в импульсном представлении (см. § 5 гл. III).

Отметим, что Фок в работе [195] (см. также приложение в [196]) получил в квазиклассическом приближении формулу (3.10) для

ядра оператора U_F , отвечающего классическому каноническому преобразованию (3.5) с производящей функцией $F(q, \tilde{q})$. В случае линейного канонического преобразования (3.1) квазиклассическое приближение совпадает с точным выражением для ядра U_F .

Преобразования вида (3.10) образуют представление группы $G = \text{Sp}(2N, R) \wedge H(N)$, являющейся полупрямым произведением симплектической группы $\text{Sp}(2N, R)$ и группы Гейзенберга — Вейля $H(N)$, генераторами алгебры Ли которой являются операторы q_i, p_i и единичный оператор E . Изучению этого представления посвящены работы [109, 110, 197—200].

Для того чтобы привести матрицу монодромии $\Lambda(T)$ к одной из стандартных форм, описанных выше, совершим в уравнении Шредингера (2.3) унитарное преобразование U_i вида $\Psi = U_i \phi$. Волновые функции ϕ удовлетворяют уравнению Шредингера (2.3) с преобразованным гамильтонианом $\mathcal{H}' = U_i^\dagger \mathcal{H} U_i$. Очевидно, что спектры КЭ гамильтонианов \mathcal{H}' и \mathcal{H} совпадают. Если в качестве U_i взять линейное каноническое преобразование (3.1), то гамильтониан снова оказывается квадратичным по \tilde{p} и \tilde{q} и имеет вид

$$\mathcal{H}' = \tilde{Q} B' \tilde{Q} + C' \tilde{Q} + H'_0, \quad (3.11)$$

где $B' = \tilde{l} B \tilde{l}$; $C' = \tilde{l} (C + (B + \tilde{B}) \mathbf{d})$; $H'_0 = \mathbf{d} B \mathbf{d} + C \mathbf{d} + H_0$.

Интегралы движения I (2.5), отвечающие гамильтониану \mathcal{H} , перейдут в интегралы движения I' гамильтониана \mathcal{H}' :

$$I' = U_i^\dagger I U_i = \Lambda' \tilde{Q} + \delta', \quad (3.12)$$

где

$$\Lambda' = \tilde{l}^{-1} \Lambda \tilde{l}; \quad \delta' = \tilde{l}^{-1} (\delta + \Lambda \mathbf{d}) \quad (3.13)$$

удовлетворяют соответствующим соотношениям (2.5) — (2.8).

Выберем теперь параметры преобразования U_i вида (3.1) следующим образом. Пусть матрица $\Lambda(T)$ имеет вид

$$\Lambda(T) = l_\Lambda \exp \{h^{(K, l)}\} l_\Lambda^{-1}.$$

Тогда, полагая l , входящее в (3.1), равным l_Λ , находим, что $\Lambda'(T) = \exp \{h^{(K, l)}\}$ (см. (2.12)). Сдвиг \mathbf{d} выбираем из условия $\delta'(0) = \delta'(T) = 0$ равным $\mathbf{d} = -\Lambda^{-1}(T) \delta(T)$.

Новые интегралы движения $I'(t)$ совпадают с интегралами движения квадратичного гамильтониана \mathcal{H}' , рассмотренными ранее, и удовлетворяют, кроме того, уравнению

$$I'(t + T) = \exp \{h^{(K, l)}\} I'(t). \quad (3.14)$$

Таким образом, эволюция системы за период определяется элементом картановской подалгебры $h^{(K, l)}$ вида (2.11), который полностью определяет характер спектра КЭ системы. Можно теперь считать, что гамильтониан системы, интегралы движения и матрица монодромии $\Lambda(T)$ с помощью подходящего линейного

канонического преобразования $U_{i\Lambda}$ уже приведены к стандартному виду (3.11), (3.12) и (3.14). В этих формулах, для того чтобы не усложнять изложение громоздкими обозначениями, будем в дальнейшем опускать тильду и штрих.

§ 4. Дискретный спектр квазиэнергий и когерентные состояния

Рассмотрим случай, когда матрица монодромии $\Lambda(T)$ системы с гамильтонианом (2.1) является элементом максимальной картановской компактной подгруппы $\Lambda(N, 0) = \exp \{h^{(N, 0)}\}$, где $h^{(N, 0)}$ дается (2.11). Вычисляя экспоненту от матрицы $h^{(N, 0)}$, находим явное выражение для матрицы монодромии:

$$\Lambda(T) = \begin{pmatrix} \cos h_1 & & & 0 & \sin h_1 & & & 0 \\ & \cos h_2 & & & & \sin h_2 & & \\ & & \ddots & & & & \ddots & \\ 0 & & & \cos h_N & 0 & & & \sin h_N \\ -\sin h_1 & & & 0 & \cos h_1 & & & 0 \\ & -\sin h_2 & & & & \cos h_2 & & \\ & & \ddots & & & & \ddots & \\ 0 & & & -\sin h_N & 0 & & & \cos h_N \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

Собственные значения λ_j матрицы $\Lambda(T)$ лежат на единичной окружности $\lambda_j = e^{ih_j}$, $\lambda_j^* = e^{-ih_j}$, $j = 1, 2, \dots, N$, причем вещественные числа h_j определены по модулю 2π .

Построим из интегралов движения (3.12) операторы уничтожения и рождения

$$\begin{aligned} A_j(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [iI_j(t) + I_{N+j}(t)]; \\ A_j^\dagger(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [-iI_j(t) + I_{N+j}(t)], \end{aligned} \quad (4.2)$$

удовлетворяющие бозонным одновременным коммутационным соотношениям

$$[A_j, A_k] = [A_j^\dagger, A_k^\dagger] = 0; \quad [A_j, A_k^\dagger] = \delta_{jk}, \quad (4.3)$$

причем

$$A_j(0) = a_j = \frac{1}{\sqrt{2}} (ip_j + q_j); \quad A_j^\dagger(0) = a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (-ip_j + q_j).$$

В силу (2.4) операторы A_j , A_j^\dagger — интегралы движения — можно выразить через операторы p и q^*):

* В соответствии с соглашением (см. выше) в дальнейшем опускаем знак «штрих».

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\lambda_p \mathbf{p} + \lambda_q \mathbf{q} + \Delta), & \lambda_p &= \lambda_3 + i\lambda_1; \\
 \mathbf{A}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\lambda_p^* \mathbf{p} + \lambda_q^* \mathbf{q} + \Delta^*), & \lambda_q &= \lambda_4 + i\lambda_2,
 \end{aligned}
 \tag{4.4}$$

а также через операторы \mathbf{a} , \mathbf{a}^\dagger — начальные точки:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{A}^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \lambda_q - i\lambda_p & \lambda_q + i\lambda_p \\ \lambda_q^* - i\lambda_p^* & \lambda_q^* + i\lambda_p^* \end{vmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{a}^\dagger \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \Delta \\ \Delta^* \end{pmatrix}.$$

Подставляя (4.4) в коммутационные соотношения (4.3), находим полезные тождества, эквивалентные условиям симплектичности матрицы $\Lambda(t)$ (см. (5.33) гл. III):

$$\lambda_p \lambda_q^\dagger - \lambda_q \lambda_p^\dagger = 2iE; \quad \lambda_p \tilde{\lambda}_q = \lambda_q \tilde{\lambda}_p.
 \tag{4.5}$$

Используя (2.14), (4.2) и (4.1), можно показать, что операторы $\mathbf{A}(t)$ (4.4) удовлетворяют соотношениям

$$\mathbf{A}_j(t + T) = e^{ih_j} \mathbf{A}_j(t); \quad \mathbf{A}_j(T) = e^{ih_j} \mathbf{a}_j.
 \tag{4.6}$$

С помощью интегралов движения \mathbf{A} построим, как обычно, нормированные когерентные состояния $|\mathbf{a}, t\rangle$, удовлетворяющие условию

$$\mathbf{A}_j(t) |\mathbf{a}, t\rangle = \mathbf{a}_j |\mathbf{a}, t\rangle
 \tag{4.7a}$$

и уравнению Шредингера

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\mathbf{a}, t\rangle = \mathcal{H}(t) |\mathbf{a}, t\rangle.
 \tag{4.7b}$$

Комплексное число \mathbf{a} задает координаты центра волнового пакета, движущегося по классической траектории в фазовом пространстве, проходящей в начальный момент через точку с координатами $\mathbf{q}^{(0)} = (\mathbf{a} + \mathbf{a}^*)/\sqrt{2}$, $\mathbf{p}^{(0)} = (\mathbf{a} - \mathbf{a}^*)/i\sqrt{2}$. Приведем явное выражение для когерентного состояния, отвечающего операторам Λ в координатах \mathbf{q} , в несколько упрощенной по сравнению с [76] форме, следуя [104] (см. (4.56) гл. III):

$$\begin{aligned}
 |\mathbf{a}, t\rangle = |0, t\rangle \exp \left[\frac{1}{2} \mathbf{a} \lambda_p^* \lambda_p^{-1} \mathbf{a} + \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{a} (\Delta^* - \lambda_p^* \lambda_p^{-1} \Delta + \right. \\
 \left. + 2i\tilde{\lambda}_p^{-1} \mathbf{q}) - \frac{1}{2} |\mathbf{a}|^2 \right],
 \end{aligned}
 \tag{4.8}$$

где «вакуум»

$$|0, t\rangle = \pi^{-N/4} \exp \left(-\frac{i}{2} \mathbf{q} \lambda_p^{-1} \lambda_q \mathbf{q} - i \mathbf{q} \lambda_p^{-1} \Delta + \Phi \right),
 \tag{4.9}$$

а фаза

$$\Phi(t) = \int_0^t [\text{Sp} (\lambda_p^{-1} \lambda_q b_1 - b_3) + ic_1 \lambda_p^{-1} \Delta - i \Delta \tilde{\lambda}_p^{-1} b_1 \lambda_p^{-1} \Delta - iH_0(\tau)] d\tau.
 \tag{4.10}$$

Следует показать, что матрицы, входящие в квадратичные формы, встречающиеся в (4.8), существуют и являются симметрическими. Из условий симплектичности (см. (5.33) гл. III) следует, что

$$\lambda_p^\dagger \lambda_p = (\tilde{\lambda}_3 - i\tilde{\lambda}_1)(\lambda_3 + i\lambda_1) = \tilde{\lambda}_3\lambda_3 + \tilde{\lambda}_1\lambda_1. \quad (4.11)$$

Следовательно, матрица $\lambda_p^\dagger \lambda_p$ является вещественной и симметрической. Покажем, что матрица $\lambda_p^\dagger \lambda_p$ является положительно определенной. Предположим противоположное, т. е. пусть существует вещественный вектор $f \neq 0$ такой, что $(f, \lambda_p^\dagger \lambda_p f) = 0$. Ясно, что тогда $\lambda_p f = (\lambda_3 + i\lambda_1) f = 0$. Из вещественности λ_i и f следует $\lambda_1 f = \lambda_3 f = 0$. Применяя операторы левой и правой частей тождества $\tilde{\lambda}_2 \lambda_1 - \tilde{\lambda}_2 \lambda_3 = E$ (см. (5.33) гл. III) к вектору f , находим, что $f = 0$. Полученное противоречие доказывает положительную определенность матрицы $\lambda_p^\dagger \lambda_p$. Используя это свойство матрицы, докажем существование матрицы λ_p^{-1} . Если матрица λ_p^{-1} не существует (т. е. $\det \lambda_p = 0$), следовательно, существует ненулевой, вообще говоря, комплексный вектор $f = f_1 + if_2$ (векторы f_1 и f_2 — вещественные и $f_1^2 + f_2^2 > 0$) такой, что $\lambda_p f = 0$. Ясно, что тогда справедливо равенство $\lambda_p^\dagger \lambda_p f = \lambda_p^\dagger \lambda_p (f_1 + if_2) = 0$. Так как матрица $\lambda_p^\dagger \lambda_p$ вещественная и положительно определенная, то $f_1 = f_2 = 0$. Полученное противоречие доказывает, что матрица λ_p^{-1} существует. Покажем теперь, что матрица $\lambda_p^* \lambda_p^{-1}$, входящая в квадратичную форму (4.8), симметрическая. Из (4.11) следует, что $\lambda_p^\dagger \lambda_p = \tilde{\lambda}_p \lambda_p^*$; отсюда легко получаем требуемое: $\lambda_p^* \lambda_p^{-1} = (\lambda_p^\dagger)^{-1} \lambda_p^\dagger = \tilde{\lambda}_p^* \lambda_p^{-1}$. Аналогично, для матрицы $\lambda_p^{-1} \lambda_q$, входящей в квадратичную форму $q \lambda_p^{-1} \lambda_q q$, находим, используя (4.5), что $\lambda_p^{-1} \lambda_q = \lambda_q \tilde{\lambda}_p^{-1}$.

Волновые функции когерентных состояний $|\alpha, t\rangle$ и «вакуума» $|0, t\rangle$ содержат множитель, быстро убывающий при больших значениях $|q|$. Чтобы показать это, рассмотрим более подробно квадратичную форму, входящую в показатель экспоненты (4.8). Преобразуем эту форму к виду

$$-iq \lambda_p^{-1} \lambda_q q = \frac{i}{2} q (\lambda_p^{-1} \lambda_q + (\lambda_p^*)^{-1} \lambda_q^*) q - \frac{i}{2} q (\lambda_p^{-1} \lambda_q - (\lambda_p^*)^{-1} \lambda_q^*) q,$$

где, очевидно, первая квадратичная форма — чисто мнимая, а вторая — вещественная и отрицательно определенная. Используя (4.5), получаем

$$-\frac{i}{2} q (\lambda_p^{-1} \lambda_q - (\lambda_p^*)^{-1} \lambda_q^*) q = -q \lambda_p^{-1} (\lambda_p^\dagger)^{-1} q < 0,$$

Из последнего неравенства следует, что волновые функции (4.8) экспоненциально убывают с ростом $|\mathbf{q}|$. В силу этого когерентные состояния можно нормировать: $\langle \mathbf{\alpha}, t | \mathbf{\alpha}, t \rangle = 1$.

Рассмотрим фокковские состояния $|\mathbf{n}, t\rangle$ системы, введенные в [76], удовлетворяющие уравнению Шредингера и являющиеся собственными для квадратичных операторов $N_j = A_j^\dagger A_j$:

$$N_j |\mathbf{n}, t\rangle = n_j |\mathbf{n}, t\rangle. \quad (4.12)$$

В силу своего построения (см. § 4 гл. III) когерентные состояния (4.7) являются производящими для фокковских состояний:

$$|\mathbf{\alpha}, t\rangle = e^{-|\mathbf{\alpha}|^2/2} \sum_{n_j=1}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^N \frac{\alpha_j^{n_j}}{\sqrt{n_j!}} \right) |\mathbf{n}, t\rangle. \quad (4.13)$$

Ввиду полноты системы когерентных состояний $|\mathbf{\alpha}, t\rangle$, фокковские состояния образуют полную ортогональную систему

$$|\Psi\rangle = \sum_n \langle \Psi | \mathbf{n}, t \rangle |\mathbf{n}, t\rangle, \quad \langle \mathbf{m}, t | \mathbf{n}, t \rangle = \delta_{mn}. \quad (4.14)$$

Покажем, что фокковские состояния (4.12) являются квазиэнергетическими состояниями гамильтониана (2.11) в смысле определения (2.4).

Действительно, запишем (4.7) в момент времени $t + T$:

$$A_j (T + t) |\mathbf{\alpha}, t + T\rangle = \alpha_j |\mathbf{\alpha}, t + T\rangle. \quad (4.15)$$

Используя (4.6) и (4.7), из (4.15) получаем

$$e^{h_j} A_j (t) |\mathbf{\alpha}, t + T\rangle = A_j (t + T) |\mathbf{\alpha}, t + T\rangle = \alpha_j |\mathbf{\alpha}, t + T\rangle. \quad (4.16)$$

В силу единственности решения системы (4.7), т. е. простоты спектра операторов A_j и полноты системы когерентных состояний $|\mathbf{\alpha}, t\rangle$, из (4.16) заключаем, что

$$|\alpha_j, t + T\rangle = \exp(-i\varepsilon_0 T) |e^{-ih_j} \alpha_j, t\rangle. \quad (4.17)$$

Фаза ε_0 легко получается из (4.8)–(4.10) и равна

$$\varepsilon_0 = i\Phi(T)/T. \quad (4.18)$$

Соотношение (4.17) показывает, что эволюция когерентного состояния за период T сводится к повороту в каждой плоскости α_j на угол $-h_j$ в полном соответствии с (4.1) и соотношением (4.6). Подставляя теперь формулу (4.13) в левую и правую части (4.17) и сравнивая члены при одинаковых степенях α , находим

$$|\mathbf{n}, t + T\rangle = \exp\left[-i\left(\varepsilon_0 T + \sum_j n_j h_j\right)\right] |\mathbf{n}, t\rangle. \quad (4.19)$$

Сравнение выражения (4.19) с условием квазипериодичности (2.4) доказывает, что состояния $|\mathbf{n}, t\rangle$ являются квазиэнергетическими

состояниями, а спектр квазиэнергий является чисто дискретным:

$$\varepsilon = \frac{1}{T} \sum_j h_j \left(n_j + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{T} \int_0^T \left[\frac{1}{2} \operatorname{Im} (\Delta \dot{\Delta}) + H_0(\tau) \right] d\tau. \quad (4.20)$$

Числа h_j определены в силу (2.4) и (2.12) по модулю 2π .

КЭС, отвечающие фоковским состояниям $|n, t\rangle$, можно явным образом выразить через полиномы Эрмита от N переменных [88, 223], используя (4.8) и производящую функцию (4.13):

$$|n, t\rangle = |0, t\rangle (n_1! n_2! \dots n_N!)^{-1/2} H_{n_1 n_2 \dots n_N}(x), \quad (4.21)$$

где $x = 2^{-1/2} \lambda_p \lambda_p^{-1} (\tilde{\lambda}_p \lambda_p^\dagger \Delta - \Delta^* - 2i \tilde{\lambda}_p^{-1} q)$ и $|0, t\rangle$ дается формулой (4.9).

Обсудим теперь характер спектра КЭ (4.18). Как было отмечено выше, числа h_j определены по модулю 2π , а квазиэнергия — с точностью до $2\pi N/T$ ($N = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$).

Если все отношения $h_j/2\pi$ ($j = 1, 2, \dots, N$) — числа линейно независимые, с целочисленными коэффициентами m_j , т. е. $\sum_j m_j h_j \neq 0 \pmod{2\pi}$, то каждое собственное значение КЭ (4.20) не вырождено, причем КЭ ε всюду плотно заполняет отрезок $[0, 2\pi/T]$. Если $\sum_j m_j h_j = 0 \pmod{2\pi}$ (m_j — целые числа), то появляется вырождение спектра КЭ. Если все отношения $h_j/2\pi$ — рациональные числа, то спектр КЭ конечный, причем каждому собственному значению ε отвечает счетная последовательность КЭС (4.21).

§ 5. Непрерывный спектр квазиэнергий

Рассмотрим случай, когда система описывается гамильтонианом (2.1), которому отвечает матрица монодромии $\Lambda(T)$, являющаяся элементом максимальной некомпактной картановской подгруппы $\Lambda_{(0,0)} = \exp \{h^{(0,0)}\}$. В этом случае $\Lambda(T)$ — диагональная матрица и ее собственные значения — вещественные числа вида $\lambda_j = e^{\pm h_i}$ ($j = 1, 2, \dots, N$), где h_i — вещественные числа.

Тогда для операторов $I_j(T)$ (см. (3.14)), используя (2.11), находим

$$\begin{aligned} I_j(t+T) &= e^{h_j} I_j(t), \quad j = 1, 2, \dots, N; \\ I_{j+N}(t+T) &= e^{-h_j} I_{j+N}(t). \end{aligned} \quad (5.1)$$

Рассмотрим состояния системы $|k, t\rangle$, являющиеся собственными для взаимно коммутирующих интегралов $I_j(t)$ ($j = 1, 2, \dots, N$):

$$I_j |k, t\rangle = k_j |k, t\rangle, \quad (5.2)$$

и, кроме того, удовлетворяющие уравнению Шредингера

$$i \frac{\partial}{\partial t} |k, t\rangle = \mathcal{H} |k, t\rangle. \quad (5.3)$$

Используя явный вид инвариантов $I_j(t)$ (2.5), находим решения системы (5.2), (5.3):

$$|k, t\rangle = (2\pi)^{-N/2} \exp \left[-\frac{i}{2} q \lambda_1^{-1} \lambda_2 q + i q \lambda_1^{-1} (k - \delta_1) + \right. \\ \left. + \frac{i}{2} k \lambda_3 \lambda_1^{-1} k + k (\delta_2 - \lambda_3 \lambda_1^{-1} \delta_1) + \Phi(t) \right]. \quad (5.4)$$

Фаза

$$\Phi(t) = \int_0^t [\text{Sp}(\lambda_1^{-1} \lambda_2 b_1 - b_3) + i c_1 \lambda_1^{-1} \delta_1 - i \delta_1 \tilde{\lambda}_1^{-1} b_1 \lambda_1^{-1} \delta_1 - \\ - i H_0(\tau)] d\tau \quad (5.5)$$

может быть найдена подстановкой (5.4) в уравнение Шредингера (5.3). Отметим, что если $\det \lambda_1 \neq 0$, то волновые функции состояния $|k, t\rangle$ следует вычислять в координатном представлении, а если $\det \lambda_3 \neq 0$, то в импульсном. Одновременное выполнение равенств $\det \lambda_1 = \det \lambda_3 = 0$ невозможно в силу условий симплектичности (см. (5.33) гл. III).

Состояния (5.4) нормированы согласно условию

$$\langle k', t | k, t \rangle = \delta(k - k') \quad (5.6)$$

и являются временной эволюцией плоских волн — состояний, обладающих в начальный момент определенным импульсом k . Они могут быть получены путем вычисления преобразования Фурье по второму аргументу от ядра функции Грина гамильтониана $\mathcal{H}(t)$, приведенной в § 5 гл. III (см. (5.35)). Волновые пакеты (5.4) образуют полную систему.

Аналогично тому, как это было сделано в § 4 в случае дискретного спектра, используя (5.4) — (5.6), находим соотношение

$$|k_j, t + T\rangle = \exp[\Phi(T)] |k_j e^{-h_j}, t\rangle. \quad (5.7)$$

Рассмотрим состояния $|v_i, t\rangle$, получающиеся из состояний $|k_i, t\rangle$ с помощью преобразования Меллина [193]

$$|v_j, \epsilon_j, t\rangle = \int |k_j, t\rangle \prod_{j=1}^N |k_j|^{-i v_j - 1/2} (\text{sign } k_j)^{\epsilon_j} dk_j, \quad (5.8)$$

где v_j — вещественные числа, а числа ϵ_j принимают значения 0 и 1.

Известно, что преобразование (5.8) имеет обращение того же вида:

$$|k_j, t\rangle = \sum_{\epsilon_j=0,1} \int |v_j, \epsilon_j, t\rangle \prod_{j=1}^N |k_j|^{i v_j - 1/2} (\text{sign } k_j)^{\epsilon_j} dv_j, \quad (5.9)$$

где в сумме имеется 2^N слагаемых, отвечающих всевозможным наборам чисел ϵ_j .

Волновые функции состояния $|v_j, \epsilon_j, t\rangle$ можно выразить через функции $H_{v, \epsilon}(\mathbf{x})$, являющиеся естественным многомерным обобщением функций Эрмита одной переменной с непрерывным индексом (функцией параболического цилиндра [116]). Подставляя производящую функцию (5.4) в (5.8), находим

$$|v_j, \epsilon_j, t\rangle = \left[\prod_{j=1}^N \Gamma\left(iv_j + \frac{1}{2}\right) \right]^{-1/2} H_{v, \epsilon}(\mathbf{x}) |0, t\rangle; \quad (5.10)$$

здесь «вакуум»

$$|0, t\rangle = (2\pi)^{-N/2} \exp \left[-\frac{i}{2} \mathbf{q} \lambda_1^{-1} \lambda_2 \mathbf{q} - i \mathbf{q} \lambda_1^{-1} \delta_1 + \Phi(t) \right] \quad (5.11)$$

и

$$H_{v, \epsilon}(\mathbf{x}) = \left[\prod_{j=1}^N \Gamma\left(iv_j + \frac{1}{2}\right) \right]^{1/2} \int \exp \left(\frac{i}{2} k \lambda_3 \lambda_1^{-1} k + ik \delta_2 + i \mathbf{q} \lambda_1^{-1} k - \right. \\ \left. - ik \lambda_3 \lambda_1^{-1} \delta_1 \right) \prod_{j=1}^N |k_j|^{-iv_j - 1/2} (\text{sign } k_j)^{\epsilon_j} dk_j, \quad (5.12)$$

где

$$\mathbf{x} = \lambda_1 \lambda_3^{-1} (\tilde{\lambda}_1^{-1} \mathbf{q} + \delta_2 - \lambda_3 \lambda_1^{-1} \delta_1). \quad (5.13)$$

Состояния $|v_j, \epsilon_j, t\rangle$ являются собственными функциями квадратичных интегралов движения $N_j = 1/2 (I_{j+N} I_j + I_j I_{j+N})$, совпадающих в начальный момент времени с операторами растяжения вдоль оси j в пространстве координат \mathbf{q} :

$$N_j |v_j, \epsilon_j, t\rangle = v_j |v_j, \epsilon_j, t\rangle. \quad (5.14)$$

Состояния $|v_j, \epsilon_j, t\rangle$, ввиду полноты и ортогональности системы $|k, t\rangle$, как следует из (5.5) и (5.8), образуют полную ортонормальную систему. Используя (5.7), легко проверить, что состояния $|v_j, \epsilon_j, t\rangle$ являются КЭС в смысле (2.4) и определяют спектр КЭ вида

$$\epsilon = \frac{1}{T} \sum_{j=1}^N v_j h_j + \epsilon_0, \quad (5.15)$$

где

$$\epsilon_0 = \frac{1}{T} \int_0^T [\dot{\delta}_2 \delta_1 + H_0(\tau)] d\tau.$$

Спектр (5.15) 2^N -кратно вырожден по квантовым числам ϵ_j . Это вырождение может быть связано с группой Вейля симплектической группы $\text{Sp}(2N, R)$.

§ 6. Смешанный спектр квазиэнергий

Рассмотрим сначала частный случай, когда матрица монодромии $\Lambda(T)$ является элементом картановской группы $\Lambda_{(0, N/2)} = \exp \{h^{(0, N/2)}\}$, где $h^{(0, N/2)}$ — матрица вида (2.13), построенная только из блоков $b^{(r)}$. Это возможно в случае четного $N = 2l$. Вычисляя $\exp \{h^{(0, N/2)}\}$, находим явное выражение для $\Lambda(T)$:

$$\Lambda(T) = \left\| \begin{array}{ccc} B^{(1)} & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ & & B^{(l)} \\ & & (B^{(1)})^{-1} \\ & & \ddots \\ \mathbf{0} & & (B^{(l)})^{-1} \end{array} \right\|, \quad B^{(r)} = e^{h_{l+r}} \left\| \begin{array}{cc} \cos h_r & -\sin h_r \\ \sin h_r & \cos h_r \end{array} \right\|. \quad (6.1)$$

Собственные значения матрицы $\Lambda(T)$ — комплексные числа вида

$$\lambda_r = \exp(\pm h_{r+l} \pm ih_r), \quad r = 1, 2, \dots, l = N/2.$$

Наряду с интегралами движения $I_j(t)$ (3.12) рассмотрим их линейные комбинации

$$Z_r = I_{2r-1} + iI_{2r}, \quad r = 1, 2, \dots, N/2. \quad (6.2)$$

Операторы Z_r являются нормальными, т. е. коммутируют со своими эрмитово-сопряженными операторами:

$$[Z_r, Z_s] = 0; \quad [Z_r, Z_s^\dagger] = 0; \quad [Z_r^\dagger, Z_s^\dagger] = 0. \quad (6.3)$$

Коммутационные соотношения (6.3) являются следствием эрмитовости и взаимной коммутативности интегралов движения I_j , $j = 1, 2, \dots, N$ (см. (2.7)). Используя соотношения (3.14) и (6.2), а также явный вид матрицы $\Lambda(T)$ (6.1), находим связь между операторами $Z_r(t+T)$ и $Z_r(t)$ в виде

$$Z_r(t+T) = e^{h_{r+l} + ih_r} Z_r(t), \quad r = 1, 2, \dots, l. \quad (6.4)$$

Рассмотрим состояния $|\mathcal{z}, t\rangle$, диагонализующие полный набор операторов Z_r, Z_r^\dagger , $r = 1, 2, \dots, l$, и, кроме того, удовлетворяющие уравнению Шредингера (2.3):

$$Z_r |\mathcal{z}, t\rangle = z_r |\mathcal{z}, t\rangle; \quad Z_r^\dagger |\mathcal{z}, t\rangle = z_r^* |\mathcal{z}, t\rangle, \quad (6.5)$$

где z_r — комплексные числа. Используя инварианты (6.2), находим решение системы (6.5) в виде

$$|\mathcal{z}, t\rangle = |\mathcal{k}, t\rangle, \quad (6.6)$$

где $|\mathcal{k}, t\rangle$ дается формулой (5.3), а координаты вектора k_r выражаются через z_r следующим образом: $k_{2r} = \text{Im } z_r$, $k_{2r-1} = \text{Re } z_r$. Состояния $|\mathcal{z}, t+T\rangle$ и $|\mathcal{z}, t\rangle$ связаны соотношением

$$|\mathcal{z}_r, t+T\rangle = \exp[\Phi(t)] |z_r \exp(-h_{r+l} - ih_r), t\rangle, \quad (6.7)$$

где $\Phi(T)$ определяется, как в (5.5). Соотношение (6.7) легко проверить, используя (6.5), (6.6) и явное выражение для фазы $\Phi(t)$.

Состояния с определенной квазиэнергией получаются из состояний $|z, t\rangle$ с помощью комплексного преобразования Меллина

$$|m_r, \rho_r, t\rangle = \int |z_r, t\rangle \prod_{r=1}^l |z_r|^{i\rho_r - 1} z_r^{m/2} z_r^{*-m/2} d^2 z_r, \quad (6.8)$$

$$d^2 z_r = d(\operatorname{Re} z_r) d(\operatorname{Im} z_r),$$

где ρ_r — вещественные положительные числа, а m — целые. Используя формулы (6.7) и (6.8), получаем спектр квазиэнергий смешанного вида

$$\epsilon = \frac{1}{T} \sum_{r=1}^{N/2} (m_r h_r + \rho_r h_{r+l}) + \epsilon_0, \quad (6.9)$$

$$\epsilon_0 = -\operatorname{Im} \Phi(T)/T,$$

отвечающий квазиэнергетическим состояниям (6.8).

Рассмотрим теперь общий случай, когда матрица монодромии $\Lambda(T)$ является некоторым элементом картановской подгруппы $\Lambda_{(K,l)}$ вида $\Lambda_{(K,l)} = \exp\{h^{(K,l)}\}$, где $h^{(K,l)}$ дается формулой (2.11). Приведем явное выражение матрицы $\Lambda(T)$ размером $2N \times 2N$ в блочном виде:

$$\Lambda(T) = \begin{pmatrix} A_K^{(1)} & 0 & 0 & A_K^{(2)} & 0 & 0 \\ 0 & B_l & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C & 0 & 0 & 0 \\ -A_K^{(2)} & 0 & 0 & A_K^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & B_l^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C^{-1} \end{pmatrix}. \quad (6.10)$$

Блоки $A_K^{(1)}$, $A_K^{(2)}$ — диагональные матрицы размером $K \times K$:

$$A_K^{(1)} = \begin{pmatrix} \cos h_1 & & & \mathbf{0} \\ & \cos h_2 & & \\ & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & \cos h_K \end{pmatrix}; \quad A_K^{(2)} = \begin{pmatrix} \sin h_1 & & & \mathbf{0} \\ & \sin h_2 & & \\ & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & \sin h_K \end{pmatrix}. \quad (6.11)$$

Матрица C — диагональная, размером $(N - K - 2l) \times (N - K - 2l)$:

$$C = \begin{pmatrix} e^{h_{K+2l+1}} & \mathbf{0} \\ & e^{h_{K+2l+2}} \\ & & \ddots \\ \mathbf{0} & & & e^{h_N} \end{pmatrix}. \quad (6.12)$$

Матрица B_l размером $2l \times 2l$ состоит из l блоков вида $B^{(r)}$:

$$B_l = \begin{vmatrix} B^{(1)} & & & \mathbf{0} \\ & B^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & B^{(l)} \end{vmatrix}, \quad B^{(r)} = e^{h_{K+l+r}} \begin{vmatrix} \cos h_{K+r} & -\sin h_{K+r} \\ \sin h_{K+r} & \cos h_{K+r} \end{vmatrix}. \quad (6.13)$$

Числа h_i ($i = 1, 2, \dots, N$), входящие в (6.11)–(6.13), вещественные, причем $h_i \neq 0$, $i = 1, 2, \dots, K$ и $h_{K+l+r} \neq 0$, $r = 1, 2, \dots, l$. Среди собственных значений матрицы $\Lambda(T)$ имеется $2K$ комплексных чисел, лежащих на единичной окружности, $4l$ комплексных чисел, не лежащих на единичной окружности, и $2(N - K - 2l)$ вещественных чисел.

Интегралы движения I удобно представить, используя блочно-матричную запись:

$$\begin{pmatrix} I^1 \\ I^2 \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 \\ \lambda_3 & \lambda_4 \end{vmatrix} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \end{pmatrix}.$$

Кроме того, каждую квадратную матрицу λ_i размером $N \times N$ разобьем на блоки вида

$$\lambda_i = \begin{vmatrix} \lambda_i^{(1)} & \lambda_i^{(2)} \\ \lambda_i^{(3)} & \lambda_i^{(4)} \end{vmatrix}, \quad i = 1, 2, 3, 4,$$

где $\lambda_i^{(1)}$ — квадратная матрица размером $K \times K$, $\lambda_i^{(4)}$ — размером $(N - K) \times (N - K)$, матрицы $\lambda_i^{(2)}$ и $\lambda_i^{(3)}$ — прямоугольные. Соответственно этому N -мерные векторы δ_1 и δ_2 естественно разбить на два вектора: K -мерный $\delta_1^{(1)}$ ($\delta_2^{(2)}$) и $(N - K)$ -мерный $\delta_1^{(2)}$ ($\delta_2^{(2)}$).

Из коммутативных интегралов $I_j(t)$, $j = 1, 2, \dots, N$, строим операторы $A_i = 2^{-1/2} (iI_i + I_{i+N})$, $i = 1, 2, \dots, K$, операторы Z_K^\dagger , $Z_r = I_{K+2r-1} + iI_{K+2r}$, $r = 1, 2, \dots, l$, и I_s , $s = K + 1, \dots, N$, которые взаимно коммутируют и образуют полный набор. Построим состояние $|\alpha, z, k, t\rangle$, удовлетворяющее уравнению Шредингера и являющееся собственным для этих операторов:

$$\begin{aligned} A_i |\alpha, z, k, t\rangle &= \alpha_i |\alpha, z, k, t\rangle, \quad i = 1, 2, \dots, K; \\ Z_r |\alpha, z, k, t\rangle &= z_r |\alpha, z, k, t\rangle; \\ Z_r^\dagger |\alpha, z, k, t\rangle &= z_r^* |\alpha, z, k, t\rangle, \quad r = 1, 2, \dots, l; \\ I_s |\alpha, z, k, t\rangle &= k_s |\alpha, z, k, t\rangle, \quad s = K + 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (6.14)$$

где числа k_s — вещественные, а α_i и z_r — комплексные. Состояния $|\alpha, z, k, t\rangle$ нормированы согласно условию

$$\langle \alpha', z', k', t | \alpha, z, k, t \rangle = \delta(k' - k) \delta(z' - z) \exp(-|\alpha|^2/2 - |\alpha'|^2/2 - \alpha^* \alpha), \quad (6.15)$$

где $\delta(z' - z) = \prod_{r=1}^l \delta(z_r^{(1)} - z_r^{(1)'}) \delta(z_r^{(2)} - z_r^{(2)'})$, $z_r = z_r^{(1)} + iz_r^{(2)}$.

Приведем явные выражения для волновой функции состояния

$$|\alpha, z, k, t\rangle = |0, 0, 0, t\rangle \exp(-\xi J \mu_3 \mu_1^{-1} \xi / 2 - \xi J \mu_3 \mu_1^{-1} S_1 + S_2 J \xi - |\alpha|^2 / 2), \quad (6.16)$$

где «вакуум» и фазы $\Phi(t)$ равны соответственно

$$|0, 0, 0, t\rangle = \pi^{-K/4} (2\pi)^{-(N+K)/2} \exp(iq \mu_1^{-1} \mu_2 q / 2 + iq \mu_1^{-1} \xi - iq \mu_1^{-1} S_1 + \Phi(t)), \quad (6.17)$$

$$\Phi(t) = \int_0^t [-iH_0(\tau) + \text{Sp}(b_1 \mu_1^{-1} \mu_2 - b_2) + i(c_1 \mu_1^{-1} S_1 - S_1 \tilde{\mu}_1^{-1} b_1 \mu_1^{-1} S_1)] d\tau. \quad (6.18)$$

Матрицы μ_i , J и векторы ξ , S_1 , S_2 , входящие в (6.16) — (6.18), имеют вид

$$\begin{aligned} \mu_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \lambda_p^{(1)} & \lambda_p^{(2)} \\ \sqrt{2}\lambda_1^{(3)} & \sqrt{2}\lambda_1^{(4)} \end{vmatrix}; & \mu_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \lambda_q^{(1)} & \lambda_q^{(2)} \\ \sqrt{2}\lambda_2^{(3)} & \sqrt{2}\lambda_2^{(4)} \end{vmatrix}; \\ \mu_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \lambda_p^{*(1)} & \lambda_p^{*(2)} \\ \sqrt{2}\lambda_3^{(3)} & \sqrt{2}\lambda_3^{(4)} \end{vmatrix}; & J &= \begin{vmatrix} E_K & 0 \\ 0 & iE_{N-K} \end{vmatrix}; \\ \xi &= \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}; & S_1 &= \begin{pmatrix} \Delta \\ \delta_1^{(2)} \end{pmatrix}; & S_2 &= \begin{pmatrix} \Delta^* \\ \delta_2^{(2)} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где $\lambda_p^{(i)} = i\lambda_1^{(i)} + \lambda_3^{(i)}$, $\lambda_q^{(i)} = i\lambda_2^{(i)} + \lambda_4^{(i)}$, $\sqrt{2}\Delta = i\delta_1^{(1)} + \delta_2^{(1)}$, $i\beta_{2r} + \beta_{2r-1} = z_r$, $r = 1, 2, \dots, l$, $\beta_{s-K} = k_s$, $s = K + 2l + 1, \dots, N$; E_K и E_{N-K} — единичные матрицы размером $K \times K$ и $(N - K) \times (N - K)$ соответственно.

Используя (3.14) и (6.10), можно показать, что операторы A_i , Z_r , I_s , взятые в моменты времени $t + T$ и t , связаны между собой соотношениями вида (4.6), (5.1), (6.4). В силу этих соотношений и простоты спектра операторов между состояниями $|\alpha, z, k, t\rangle$, рассмотренными в те же моменты времени, имеется связь вида

$$|\alpha_i, z_r, k_s, t + T\rangle = \exp[\Phi(T)] |e^{-ih_i} \alpha_i, e^{-h_{K+l+r-ih_{K+r}}} z_r, e^{-h_s} k_s, t\rangle. \quad (6.19)$$

Квазиэнергетические состояния получаются из волновых пакетов (6.19) с помощью интегрального преобразования — естественного обобщения формул (4.11), (5.8), (6.8):

$$\begin{aligned} |n_i, m_r, \rho_r, \nu_s, \varepsilon_s, t\rangle &= \pi^{-K} \int |\alpha_i, z_r, k_s, t\rangle \times \\ &\times \prod_{i, r, s} \frac{(\alpha_i^*)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} e^{-\frac{|\alpha_i|^2}{2}} |z_r|^{-i\rho_r} \left(\frac{z_r}{z_r^*}\right)^{\frac{m_r}{2}} (k_s)^{-i\nu_s} (\text{sign } k_s)^{\varepsilon_s} \frac{dk_s d^2\alpha_i d^2z_r}{\sqrt{|k_s| |z_r|}}, \end{aligned} \quad (6.20)$$

где $d^2 z_r = d(\operatorname{Re} z_r) d(\operatorname{Im} z_r)$; $d^2 \alpha_i = d(\operatorname{Re} \alpha_i) d(\operatorname{Im} \alpha_i)$; числа ν_s, ρ_r — вещественные, m_r — целые, n_i — целые положительные, а ε_s принимают значения 0 и 1.

Квазиэнергетическим состояниям (6.20) отвечает спектр квазиэнергии смешанного вида

$$\varepsilon = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^K \left(n_i + \frac{1}{2}\right) h_i + \frac{1}{T} \sum_{r=1}^l (m_r h_{K+r} + \rho_r h_{K+l+r}) + \frac{1}{T} \sum_{s=K+2l+1}^N \nu_s h_s + \varepsilon_0, \quad (6.21)$$

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{T} \int_0^T [H_0(\tau) + \delta_1^{(2)} \delta_2^{(2)} - \frac{1}{2} \operatorname{Im}(\Delta^* \dot{\Delta})] d\tau.$$

Квазиэнергетические состояния $|n_i, m_r, \rho_r, \nu_s, \varepsilon_s', t\rangle$ являются собственными для полного набора квадратичных интегралов движения

$$\begin{aligned} N_i &= A_i^\dagger A_i; & D_s &= 1/2 (I_{N+s} I_s + I_s I_{N+s}); \\ M_r &= (2i)^{-1} (Z_r^\dagger Z_{N+r} - Z_r Z_{N+r}^\dagger); \\ D_r &= 1/4 (Z_r Z_{r+N}^\dagger + Z_{r+N} Z_r^\dagger + Z_{N+r}^\dagger Z_r + Z_r^\dagger Z_{N+r}), \end{aligned} \quad (6.22)$$

образующих подалгебру Картана алгебры Ли группы $\operatorname{Sp}(2N, R)$:

$$\begin{aligned} N_i |n_i, m_r, \rho_r, \nu_s, \varepsilon_s, t\rangle &= n_i |n_i, m_r, \rho_r, \nu_s, \varepsilon_s, t\rangle; \\ D_s |n_i, m_r, \rho_r, \nu_s, \varepsilon_s, t\rangle &= \nu_s |n_i, m_r, \rho_r, \nu_s, \varepsilon_s, t\rangle; \\ D_r |n_i, m_r, \rho_r, \nu_s, \varepsilon_s, t\rangle &= \rho_r |n_i, m_r, \rho_r, \nu_s, \varepsilon_s, t\rangle; \\ M_r |n_i, m_r, \rho_r, \nu_s, \varepsilon_s, t\rangle &= m_r |n_i, m_r, \rho_r, \nu_s, \varepsilon_s, t\rangle. \end{aligned} \quad (6.23)$$

§ 7. Динамическая симметрия квазиэнергетических состояний

В качестве группы симметрии нестационарной квадратичной системы можно рассматривать группу G , являющуюся полупрямым произведением вещественной симплектической группы $\operatorname{Sp}(2N, R)$ и группы Гейзенберга — Вейля $H(N)$: $G = \operatorname{Sp}(2N, R) \wedge H(N)$. В случае стационарных систем эта группа и тесно связанная с ней $I \operatorname{Sp}(2N, R)$ рассматривались в работах [201, 110].

В нестационарном случае динамическая группа остается той же, как было отмечено в [294, 74], и ее генераторы строятся из линейных интегралов движения [74]

$$X_{ij} = I_i I_j + I_j I_i, \quad Y_j = I_j, \quad Z = I. \quad (7.1)$$

Легко проверить, что X_{ij}, Y_j, I являются генераторами неприводимого унитарного представления алгебры Ли группы $G =$

$= \text{Sp}(2N, R) \wedge H(N)$. Подгруппе $\text{Sp}(2N, R)$ отвечают генераторы X_{ij} , а нормальному делителю $H(N)$ — генераторы Y_j, I [202].

Состояния (6.19) являются орбитой [202—205], порожденной подгруппой $H(N)$ из «вакуума» $|0, 0, 0, t\rangle$ путем действия на последний операторами группового сдвига:

$$|\alpha, z, k, t\rangle = \exp \left[\sum_i (-\alpha_i^* A_i + \alpha_i A_i^\dagger) + \frac{1}{2} \sum_r (z_r Z_{r+N}^\dagger + z_r^* Z_{r+N}) + \sum_s k_s I_s \right] |0, 0, 0, t\rangle. \quad (7.2)$$

Симплектическая группа $\text{Sp}(2N, R)$, являющаяся группой внешних автоморфизмов группы $H(N)$, порождает на орбите соответствующее линейное каноническое преобразование параметров α, z, k . Так как «вакуум» определяется из условий

$$A_i |0, 0, 0, t\rangle = 0; \quad Z_r |0, 0, 0, t\rangle = Z_r^\dagger |0, 0, 0, t\rangle = 0; \\ I_s |0, 0, 0, t\rangle = 0, \quad (7.3)$$

то группой изотопии (малой группой) «вакуума» является картановская подгруппа $\text{Sp}(2N, R)$ (6.10), отвечающая картановской подалгебре вида (2.12), порожденной генераторами

$$h_i = 1/2 (A_i^\dagger A_i + A_i A_i^\dagger); \quad h_r^{(1)} = (2i)^{-1} (Z_r^\dagger Z_{N+r} + Z_r Z_{N+r}^\dagger); \\ h_s = 1/2 (I_s I_{N+s} + I_{N+s} I_s); \quad h_r^{(2)} = 1/4 (Z_r Z_{r+N}^\dagger + Z_{r+N} Z_r^\dagger + \\ + Z_{N+r}^\dagger Z_r + Z_r^\dagger Z_{N+r}). \quad (7.4)$$

Из (6.22) следует, что квазиэнергетические состояния возникают в связи с задачей о разложении на неприводимые представления сужения представления группы $\text{Sp}(2N, R) \wedge H(N)$ на некоторую ее картановскую подгруппу. Геометрически это соответствует расслоению орбиты $\{\alpha, z, k\}$ на многообразия, транзитивные относительно соответствующей картановской подгруппы Ли. Квазиэнергетические состояния $|n_i, m_r, \rho_r, \nu_s, \varepsilon_s, t\rangle$ реализуют это разложение на неприводимые представления картановской подгруппы $\Lambda_{(K, l)}$. Состояние $|n_i, m_r, \rho_r, \nu_s, \varepsilon_s, t\rangle$ преобразуется по одномерному неприводимому представлению картановской подгруппы $\Lambda_{(K, l)}$, отвечающему характеру $\chi(h^{(K, l)}) = \exp \left\{ i \left[\sum_i n_i h_i + \sum_s \nu_s h_s + \sum_r (m_r h_{r+K} + \rho_r h_{r+K+l}) \right] \right\}$. Таким образом, в случае, когда матрица $\Lambda(T)$ не имеет присоединенных векторов, в §§ 4—6 получено явное выражение для спектра квазиэнергий (6.21) нестационарной квадратичной системы и найдено выражение для соответствующих квазиэнергетических состояний (6.21) в теоретико-групповых терминах. Более сложен случай

«резонансов», когда матрица $\Lambda(T)$ имеет кратные корни и отвечающие им присоединенные векторы. В этом случае возникает задача о разложении на неприводимые представления сужения представления $\text{Sp}(2N, R) \wedge H(N)$ на некоторую разрешимую подгруппу.

§ 8. Заряженная частица в периодическом поле

Полученные выше результаты могут быть проиллюстрированы на примере движения заряженной частицы в периодических во времени электрическом и магнитном полях. Гамильтониан системы в этом случае имеет следующий вид (см. § 6 гл. II):

$$\mathcal{H}(t) = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{i\omega(t)}{2} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\omega^2(t)}{8} (x^2 + y^2) - [E_x(t)x + E_y(t)y]. \quad (8.1)$$

Электрическое и магнитное поля выбраны для простоты ортогональными друг другу и равны

$$\mathbf{E}(t) = \{E_x(t), E_y(t), 0\}; \quad \mathbf{H}(t) = \{0, 0, \omega(t)\}. \quad (8.2)$$

В (8.2) использована система единиц, в которой $e/2M = 1$ и, следовательно, $H_z(t) = \omega(t)$.

Потенциалы электрического и магнитного полей выбраны в виде

$$\varphi(t) = -\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r}; \quad \mathbf{A}(t) = \frac{1}{2} [\mathbf{H}(t) \times \mathbf{r}]. \quad (8.3)$$

Движение по оси z свободное.

Гамильтониану (8.1) отвечает гамильтониан вида (2.1) с матрицей $B(t)$:

$$B(t) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & \omega/2 \\ 0 & 1 & -\omega/2 & 0 \\ 0 & -\omega/2 & \omega^2/4 & 0 \\ \omega/2 & 0 & 0 & \omega^2/4 \end{vmatrix}, \quad (8.4)$$

и вектором $C(t)$:

$$C(t) = \begin{pmatrix} E_x(t) \\ E_y(t) \end{pmatrix}. \quad (8.5)$$

Положим, что электрическое и магнитное поля периодичны во времени с периодом T :

$$\mathbf{E}(t+T) = \mathbf{E}(t); \quad \mathbf{H}(t+T) = \mathbf{H}(t). \quad (8.6)$$

Рассмотрим сначала случай, когда электрическое поле отсутствует, т. е. $\varphi \equiv 0$ и $\mathbf{E} \equiv 0$. Как показано в [69], случай, когда электрическое поле не равно нулю, сводится к задаче с $\varphi = 0$, при этом состояния с $\varphi \neq 0$ могут быть получены действием унитарного оператора на состояния с $\varphi = 0$. Интегралы движения в переменных ξ , ξ^* и t , отвечающие преобразованному гамильтониану,

имеют вид (см. § 6 гл. III)

$$A(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\dot{\varepsilon} \zeta + i \varepsilon \frac{\partial}{\partial \zeta^*} \right); \quad B(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(i \dot{\varepsilon} \zeta^* - \varepsilon \frac{\partial}{\partial \zeta} \right);$$

$$\zeta = -\frac{1}{\sqrt{2}} (x + iy) \exp \frac{i}{2} \int_0^t \omega(\tau) d\tau; \quad (8.7)$$

$$A^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\dot{\varepsilon}^* \zeta^* - i \varepsilon^* \frac{\partial}{\partial \zeta} \right); \quad B^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-i \dot{\varepsilon}^* \zeta - \varepsilon^* \frac{\partial}{\partial \zeta^*} \right),$$

где функции $\varepsilon(t)$ являются решениями уравнения для классического осциллятора

$$\ddot{\varepsilon} + \omega^2 \varepsilon / 4 = 0. \quad (8.8)$$

Решения классического уравнения (8.8) разбиваются на два типа: устойчивые и неустойчивые решения. Согласно теореме Флоке устойчивые решения имеют вид

$$\varepsilon(t + T) = \varepsilon(t) e^{i\kappa T}; \quad \varepsilon^*(t + T) = \varepsilon^*(t) e^{-i\kappa T}, \quad (8.9)$$

где κ — действительное число, а $|\varepsilon(t)|$ — функция, периодическая во времени, т. е. $|\varepsilon(t + T)| = |\varepsilon(t)|$. Комплексное решение $\varepsilon(t)$ уравнения (8.8) может быть представлено в форме $\varepsilon(t) = |\varepsilon(t)| \exp\left(i \int_0^t |\varepsilon|^{-2} d\tau\right)$ в области устойчивости, т. е. $\kappa = T^{-1} \int_0^T |\varepsilon|^{-2} d\tau$.

Используя (8.9) в качестве $\varepsilon(t)$ в интегралах движения (8.7), получим соотношения коммутации для A и B :

$$[A, B] = [A^\dagger, B] = [A, B^\dagger] = [A^\dagger, B^\dagger] = 0;$$

$$[A, A^\dagger] = [B, B^\dagger] = 1.$$

Последние два соотношения следуют из условия $\varepsilon^* \dot{\varepsilon} - \dot{\varepsilon}^* \varepsilon = 2i$. Из (8.7) с учетом (8.9) следует, что операторы A и B связаны соотношениями в моменты 0 и T следующего вида:

$$A(t + T) = e^{i\kappa_a T} A(t); \quad B(t + T) = e^{i\kappa_b T} B(t), \quad (8.10)$$

где

$$\kappa_a = \frac{1}{T} \int_0^T \left(\frac{\omega}{2} + \frac{1}{|\varepsilon|^2} \right) d\tau; \quad \kappa_b = \frac{1}{T} \int_0^T \left(-\frac{\omega}{2} + \frac{1}{|\varepsilon|^2} \right) d\tau. \quad (8.11)$$

Построим когерентные состояния $|\alpha, \beta, t\rangle$, являющиеся собственными для операторов A и B :

$$A(t) |\alpha, \beta, t\rangle = \alpha |\alpha, \beta, t\rangle; \quad (8.12)$$

$$B(t) |\alpha, \beta, t\rangle = \beta |\alpha, \beta, t\rangle.$$

Явный вид $|\alpha, \beta, t\rangle$ дается формулой (6.7) гл. II, где необходимо положить $\zeta_0 = 0$. Когерентные состояния $|\alpha, \beta, t\rangle$, как показано

выше (см. (4.13)), являются производящими функциями для квазистационарных состояний. Используя (4.15), (4.18) и (8.10), (8.11), получим выражение для дискретного спектра квазиэнергий

$$\varepsilon_{n_1 n_2} = (n_1 + 1/2) \kappa_A + (n_2 + 1/2) \kappa_B, \quad (8.13)$$

где n_1, n_2 — целые неотрицательные числа. Явный вид волновой функции состояния с квазиэнергией $\varepsilon_{n_1 n_2}$ приведен в гл. II (формула (6.8)).

Рассмотрим теперь случай неустойчивых решений (8.8). По теореме Флоке существуют два действительных линейно независимых решения $\varepsilon_1(t)$ и $\varepsilon_2(t)$ уравнения $\ddot{\varepsilon} + \omega^2 \varepsilon / 4 = 0$:

$$\varepsilon_1(t + T) = \varepsilon_1(t) e^{\kappa T}; \quad \varepsilon_2(t + T) = \varepsilon_2(t) e^{-\kappa T}, \quad (8.14)$$

причем $\dot{\varepsilon}_1 \varepsilon_2 - \varepsilon_1 \dot{\varepsilon}_2 = 2, \kappa^2 > 0$. Подстановка ε_1 и ε_2 вместо ε и ε^* , соответственно, в интегралы движения (8.7) определяет новые интегралы движения A_1, A_2, B_1, B_2 . Вследствие действительности $\varepsilon_k, k = 1, 2$, оказывается, что

$$A_k = iB_k^\dagger; \quad [A_k, A_k^\dagger] = 0, \quad k = 1, 2. \quad (8.15)$$

Построим состояния $|\alpha, t\rangle$, являющиеся собственными для одновременно коммутирующих неэрмитовых операторов A_1 и A_1^\dagger :

$$A_1 |\alpha, t\rangle = \alpha |\alpha, t\rangle; \quad A_1^\dagger |\alpha, t\rangle = \alpha^* |\alpha, t\rangle,$$

и удовлетворяющие уравнению Шредингера с гамильтонианом (8.1). Волновые функции состояний $|\alpha, t\rangle$ имеют вид

$$|\alpha, t\rangle = \frac{1}{2\pi\varepsilon_1} \exp \left[i \frac{\dot{\varepsilon}_1}{\varepsilon_1} |\zeta|^2 - \frac{iV\sqrt{2}}{\varepsilon_1} (\alpha\zeta^* + \alpha^*\zeta) - i|\alpha|^2 \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \right], \quad (8.16)$$

где $\alpha = \alpha_1 + i\alpha_2$ — комплексное число. Состояния $|\alpha, t\rangle$ нормированы согласно условию $\langle \alpha', t | \alpha, t \rangle = \delta(\alpha'_1 - \alpha_1) \delta(\alpha'_2 - \alpha_2)$. Используя (8.15) и (8.16), получим для $|\alpha, t\rangle$ связь между состояниями в моменты времени 0 и T :

$$|\alpha, t + T\rangle = e^{-\kappa T} |\alpha e^{\mu T}, t\rangle, \quad \text{где } \mu = \kappa - \frac{i}{2T} \int_0^T \omega dt.$$

Разлагая состояния (8.16) в комплексный интеграл Меллина согласно (6.8), найдем выражение для ненормированных волновых функций КЭС:

$$|\rho, m, t\rangle = (\varepsilon_2 \varepsilon_1^{-1})^{i\rho/2} (\varepsilon_1 \varepsilon_2)^{-1/2} (\zeta^* \zeta^{-1})^m |\zeta^2 \varepsilon_1^{-1} \varepsilon_2^{-1}|^{m/2} \times \\ \times \exp(i\varepsilon_1 \varepsilon_1^{-1} |\zeta|^2) L_{(i\rho-1+|m|)/2}^{[m]}(2i|\zeta|^2 \varepsilon_1^{-1} \varepsilon_2^{-1}), \quad (8.17)$$

где $L_q^{|m|}$ — функция Лагерра [88]. Спектр квазиэнергий, отвечающий этим состояниям, является смешанным и имеет вид

$$\varepsilon_{mp} = -\frac{m}{2T} \int_0^T \omega(\tau) d\tau + \rho\kappa, \quad (8.18)$$

где $\kappa = \frac{1}{T} \int_0^T (\varepsilon_1 \varepsilon_2)^{-1/2} d\tau$; m — целое положительное число,

а ρ — действительное квантовое число, являющееся собственным значением очевидного интеграла движения, а именно оператора проектирования момента на ось z .

Рассмотрим теперь случай ненулевого электрического поля $\varphi \neq 0$. В работе [69] найден унитарный оператор D , переводящий состояния $|n, t\rangle_0$ ($\varphi = 0$) в состояния с нулевым электрическим полем $|n, t\rangle_E$ (см. § 6 гл. II):

$$D = \exp \left[-i (\zeta \dot{\zeta}_0^* + \zeta^* \dot{\zeta}_0) + i \int_0^t \left(\frac{\omega^2}{4} |\zeta_0|^2 - |\dot{\zeta}_0|^2 \right) d\tau \right] \exp \left(\zeta_0 \frac{\partial}{\partial \zeta} + \zeta_0^* \frac{\partial}{\partial \zeta^*} \right), \quad (8.19)$$

где ζ_0 — решение уравнения $\ddot{\zeta}_0 + (\omega^2/4) \zeta_0 = F(t)$, $F(t) = -\frac{1}{\sqrt{2}} (E_x + iE_y) \exp \left(i \int_0^t \frac{\omega}{2} d\tau \right)$ — комплексная сила. Таким образом,

$$|n, t\rangle_E = D |n, t\rangle_0. \quad (8.20)$$

Явный вид волновых функций КЭС в случае ненулевого электрического поля дается формулой (6.8) гл. III, используя которую находим дискретный спектр квазиэнергий, отвечающий этим состояниям:

$$\varepsilon = (n_1 + 1/2) \kappa_A + (n_2 + 1/2) \kappa_B^* + \varepsilon_0, \quad (8.21)$$

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{T} \int_0^T \left(-\frac{\omega^2}{4} |\zeta_0|^2 + |\dot{\zeta}_0|^2 \right) d\tau.$$

Используя волновые функции в области неустойчивости (8.17) и применяя к ним оператор D (8.19) согласно (8.20), находим ненормированные волновые функции с заданной квазиэнергией с учетом ненулевого электрического поля в виде

$$|\rho, m, t\rangle = (\varepsilon_1 \varepsilon_2)^{-1/2} (\varepsilon_2 \varepsilon_1^{-1})^{i\rho/2} [(\zeta + \zeta_0)^2 (\varepsilon_1 \varepsilon_2)^{-1}]^{m/2} \left(\frac{\zeta + \zeta_0}{\zeta^* + \zeta_0^*} \right)^{-m/2} \times$$

$$\times \exp \left\{ i \left[\varepsilon_1 \varepsilon_1^{-1} |\zeta + \zeta_0|^2 - (\zeta \dot{\zeta}_0^* + \zeta^* \dot{\zeta}_0) + \int_0^t \left(\frac{\omega^2}{4} |\zeta_0|^2 - |\dot{\zeta}_0|^2 \right) d\tau \right] \right\} \times$$

$$\times L_p^{|m|} \left(2i \frac{|\zeta + \zeta_0|^2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \right), \quad (8.22)$$

где $p = 1/2 (i\rho + |m| - 1)$; $L_p^{|m|}(x)$ — функция Лагерра. Этим состояниям отвечает спектр квазиэнергий вида

$$\varepsilon = \frac{m}{T} \int_0^T \frac{\omega}{2} d\tau + \rho\kappa + \varepsilon_0, \quad (8.23)$$

где $\varepsilon_0 = \frac{1}{T} \int_0^T (|\dot{\xi}_0|^2 - \frac{\omega^2}{4} |\xi_0|^2) d\tau$; $\kappa = \frac{1}{T} \int_0^T (\varepsilon_1 \varepsilon_2)^{-1} d\tau$; ρ — вещественное, а m — целое число. Из (8.22) и (8.23) следует, что наличие электрического поля приводит только к его сдвигу на величину ε_0 , что находится в соответствии с найденным ранее выражением для спектра КЭ.

§ 1. Излучение нестационарной системы

Рассмотрим систему, гамильтониан которой $\mathcal{H}_0(t)$ явно зависит от времени. Оператор эволюции $U_0(t_2, t_1)$ гамильтониана $\mathcal{H}_0(t)$ удовлетворяет уравнению ($\hbar = c = 1$)

$$i \frac{dU_0(t_2, t_1)}{dt_2} = \mathcal{H}_0(t_2) U_0(t_2, t_1) \quad (1.1)$$

и условию $U_0(t_1, t_1) = I$. Оператор эволюции $U_0(t_2, t_1)$ (временная функция Грина) является унитарным оператором и удовлетворяет соотношению

$$U_0(t_1, t_2) U_0(t_2, t_3) = U_0(t_1, t_3). \quad (1.2)$$

Интегралы движения $I(t)$, отвечающие гамильтониану $\mathcal{H}_0(t)$, являются решением уравнения

$$i \frac{\partial I(t)}{\partial t} = [\mathcal{H}, I(t)]; \quad I(t)|_{t=0} = I(0). \quad (1.3)$$

В качестве $I(0)$ выбираем, как и ранее (см. § 2 гл. III), координаты q и импульсы p системы. Из (1.2) и (1.3) следует, что имеет место соотношение

$$I(t_2) U_0(t_2, t_1) = U_0(t_2, t_1) I_{\bullet}(t_1). \quad (1.4)$$

Будем рассматривать системы, которые были стационарными в далеком прошлом и станут стационарными в далеком будущем. Гамильтониан $\mathcal{H}_0(t)$ определяет два стационарных гамильтониана: $\mathcal{H}_{\text{in}} = \lim_{t \rightarrow -\infty} \mathcal{H}_0(t)$, описывающий начальные состояния системы, и $\mathcal{H}_{\text{f}} = \lim_{t \rightarrow \infty} \mathcal{H}_0(t)$ — конечные состояния. Стационарные состояния, отвечающие этим гамильтонианам, обозначим $|E, \text{in}\rangle$ и $|E, \text{f}\rangle$:

$$\mathcal{H}_{\text{in}} |\varepsilon_n, \text{in}\rangle = \varepsilon_n |\varepsilon_n, \text{in}\rangle; \quad \mathcal{H}_{\text{f}} |E_m, \text{f}\rangle = E_m |E_m, \text{f}\rangle. \quad (1.5)$$

Интегралы движения, отвечающие этим гамильтонианам, будем обозначать I^{in} и I^{f} соответственно. Амплитуды перехода между начальными и конечными стационарными состояниями вычисля-

ются с помощью временной функции Грина

$$M^{(0)} = \lim_{\substack{t_2 \rightarrow \infty, \\ t_1 \rightarrow -\infty}} \langle E_m, f | U_0(t_2, t_1) | \varepsilon_n, \text{in} \rangle. \quad (1.6)$$

В случае системы с квадратичным нестационарным гамильтонианом амплитуды перехода между фокковскими состояниями были вычислены в гл. III.

Рассмотрим переходы в нестационарной системе с излучением одного фотона. Полный гамильтониан системы в первом порядке по электромагнитному взаимодействию содержит три члена:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}} + \mathcal{H}_F, \quad (1.7)$$

где $\mathcal{H}_{\text{int}} = jA$ (A — векторный потенциал поля излучения, j — вектор тока); \mathcal{H}_F — гамильтониан свободного поля фотонов. Векторный потенциал запишем, как обычно [360], в представлении Шредингера через операторы рождения $c_{k\sigma}^\dagger$ и уничтожения $c_{k\sigma}$ фотонов с волновым вектором k , частотой ω и вектором поляризации $e_{k\sigma}$ в виде

$$A = \sqrt{\frac{4\pi}{L^3}} \sum_{k, \sigma} [e_{k\sigma} c_{k\sigma} \exp(ikr) + e_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger \exp(-ikr)] \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}, \quad (1.8)$$

причем $e_{k\sigma} e_{k'\sigma'} = \delta_{\sigma\sigma'}$, $e_{k\sigma} k = 0$ ($\sigma = 1, 2$).

Операторы рождения и уничтожения фотонов подчиняются бозонным коммутационным соотношениям

$$[c_{k\sigma}, c_{k'\sigma'}] = [c_{k\sigma}^\dagger, c_{k'\sigma'}^\dagger] = 0; \quad [c_{k\sigma}, c_{k'\sigma'}^\dagger] = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{kk'}.$$

Будем рассматривать системы, у которых ток j допускает линейное разложение по интегралам движения в виде

$$j = \sum_{\lambda} [j_{\lambda}^{(1)}(t) I_{\lambda}^{(1)}(t) + j_{\lambda}^{(2)}(t) I_{\lambda}^{(2)}(t)], \quad (1.9)$$

где

$$I_{\lambda}^{(1)}(t)|_{t_1} = p_{\lambda}; \quad I_{\lambda}^{(2)}(t)|_{t_1} = q_{\lambda}. \quad (1.10)$$

Укажем, что системы с квадратичным по координатам и импульсам гамильтонианом допускают представление j в виде (1.9) [206]. В §§ 2—5 этой главы будут рассмотрены конкретные примеры таких систем.

Построим из интегралов движения $I_{\lambda}^{(1)}$ и $I_{\lambda}^{(2)}$ операторы рождения и уничтожения:

$$A_{\lambda}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} [-iI_{\lambda}^{(1)} + I_{\lambda}^{(2)}]; \quad A_{\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2}} [iI_{\lambda}^{(1)} + I_{\lambda}^{(2)}], \quad (1.11)$$

удовлетворяющие стандартным бозонным перестановочным соотношениям.

Ток \mathbf{j} можно выразить через A_λ и A_λ^\dagger в виде

$$\mathbf{j} = \sum_\lambda (\mathbf{j}_\lambda A_\lambda + \mathbf{j}_\lambda^* A_\lambda^\dagger), \quad (1.12)$$

где

$$\mathbf{j}_\lambda = 2^{-1/2} [-i\mathbf{j}_\lambda^{(1)} + \mathbf{j}_\lambda^{(2)}]; \quad \mathbf{j}_\lambda^* = 2^{-1/2} [i\mathbf{j}_\lambda^{(1)} + \mathbf{j}_\lambda^{(2)}]. \quad (1.13)$$

В первом порядке теории возмущений функцию Грина гамильтониана \mathcal{H} можно, как известно (см. [99], стр. 142, (6.17)), представить в виде

$$U^{(1)}(t_2, t_1) = U_0(t_2, t_1) U_F(t_2, t_1) - i \int_{t_1}^{t_2} d\tau U_0(t_2, \tau) U_F(t_2, \tau) \mathcal{H}_{\text{int}}(\tau) U_0(\tau, t_1) U_F(\tau, t_1), \quad (1.14)$$

где U_F — оператор эволюции, отвечающий гамильтониану свободного поля фотонов \mathcal{H}_F , а $\mathcal{H}_{\text{int}}(\tau) = \mathbf{j}A$.

Амплитуда перехода в первом порядке по электромагнитному взаимодействию $\mathbf{j}A$, описывающая процессы излучения и поглощения фотона при переходах между стационарными состояниями, дается выражением

$$M^{(1)} = \langle E_m, \mathbf{f}; m_\gamma | U^{(1)}(t_2, t_1) | \varepsilon_n, \text{in}; n_\gamma \rangle, \quad (1.15)$$

где n_γ и m_γ — числа фотонов в начальном и конечном состоянии соответственно. Подставляя в (1.15) функцию Грина $U^{(1)}$ (1.14) и используя соотношение (1.4), находим в дипольном приближении при $m_\gamma \neq n_\gamma$

$$M^{(1)} = \langle E_m, \mathbf{f}; m_\gamma | U(t_2, t_1) \sum_\lambda [\mathbf{j}_\lambda(\omega) \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} A_\lambda(t_1) + \mathbf{j}_\lambda^*(\omega) \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} A_\lambda^\dagger(t_1)] | \varepsilon_n, \text{in}, n_\gamma \rangle, \quad (1.16)$$

где

$$\mathbf{j}_\lambda(\omega) = \int_{t_1}^{t_2} e^{-i\omega\tau} \mathbf{j}_\lambda(\tau) d\tau. \quad (1.17)$$

Выбирая теперь для интегралов движения $A(t)$ в качестве начальных условий $A^{\text{in}}(t)$ и устремляя t_2 и t_1 к бесконечности, получаем

$$M^{(1)} = \sum_{n'} M_{mn'}^{(0)} \sum_\lambda [\langle n' | A_\lambda^{\text{in}} | n \rangle (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{j}_\lambda(\omega)) + \langle n' | (A_\lambda^{\text{in}})^\dagger | n \rangle (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{j}_\lambda(\omega))], \quad (1.18)$$

где амплитуда перехода $M_{mn'}^{(0)}$ в нестационарной системе без излучения фотона равна

$$M_{mn'}^{(0)} = \lim_{\substack{t_2 \rightarrow \infty \\ t_1 \rightarrow -\infty}} \langle E_m, \mathbf{f} | U_0(t_2, t_1) | \varepsilon_{n'}, \text{in} \rangle. \quad (1.19)$$

Матричные элементы $\langle n' | A_\lambda^{\text{in}} | n \rangle$ берутся по начальным состояниям:

$$\langle n' | A_\lambda^{\text{in}} | n \rangle \equiv \langle \varepsilon_{n'}, \text{in} | A_\lambda^{\text{in}} | \varepsilon_n, \text{in} \rangle. \quad (1.20)$$

Из (1.16) следует, что зависимость матричного элемента $M^{(1)}$ от частоты содержится только в фурье-компонентах тока $j_\lambda(t)$ вида

$$j_\lambda(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega\tau} j_\lambda(\tau) d\tau. \quad (1.21)$$

Наряду с переходами между стационарными состояниями можно рассматривать переходы с излучением (поглощением) фотона между когерентными состояниями системы.

Амплитуда перехода между когерентными состояниями с излучением фотона дается формулой

$$M_{\beta\alpha}^{(1)} = \langle \beta, f; m_\nu | U^{(1)}(t_2, t_1) | \alpha, \text{in}, n_\nu \rangle, \quad (1.22)$$

где $|\alpha\rangle$ — нормированный собственный вектор операторов a_λ :

$$a_\lambda |\alpha\rangle = \alpha_\lambda |\alpha\rangle, \quad a_\lambda = 2^{-1/2}(ip_\lambda + q_\lambda). \quad (1.23)$$

Подставляя в (1.22) явное выражение для функции Грина (1.14), находим формулу, аналогичную (1.18):

$$M_{\beta\alpha}^{(1)} = \int d\alpha' \sum_\lambda [\langle \alpha' | A_\lambda^{\text{in}}(t) | \alpha \rangle e_{\kappa\sigma} j_\lambda(\omega) + \langle \alpha' | (A_\lambda^{\text{in}})^\dagger(t_1) | \alpha \rangle e_{\kappa\sigma} j_\lambda(\omega)] M_{\beta\alpha'}^{(0)}, \quad (1.24)$$

где $d\alpha = \prod_\mu \frac{1}{\pi} d(\text{Re } \alpha_\mu) d(\text{Im } \alpha_\mu)$. Переходя к пределу в (1.24)

при $t_2 \rightarrow \infty$ и $t_1 \rightarrow -\infty$ с учетом $\langle \alpha' | A_\lambda(t_1) | \alpha \rangle = \alpha_\lambda \langle \alpha' | \alpha \rangle$ (см. (1.10) и (1.23)), находим выражение для амплитуды перехода с излучением (поглощением) фотона через амплитуду перехода без излучения (поглощения):

$$M_{\beta\alpha}^{(1)} = \sum_\lambda \left[e_{\kappa\sigma} j_\lambda(\omega) \alpha_\lambda M_{\beta\alpha}^{(0)} - e_{\kappa\sigma} j_\lambda(\omega) \frac{\partial}{\partial \alpha_\lambda} \exp\left(\frac{|\alpha|^2}{2}\right) M_{\beta\alpha}^{(0)} \right], \quad (1.25)$$

где

$$M_{\beta\alpha}^{(0)} = \langle \beta, f | U_0(t_2, t_1) | \alpha, \text{in} \rangle. \quad (1.26)$$

§ 2. Излучение заряженной частицы в стационарных скрещенных полях

В этом параграфе рассмотрим в качестве примера, иллюстрирующего общую схему, изложенную в § 1, задачу о движении и излучении заряда, находящегося в постоянном однородном магнитном поле и постоянном неоднородном электрическом поле, потенциал которого является квадратичной формой координат.

Поля подобного рода создаются в различных приборах, таких например, как магнетрон [208, 209] и строфотрон [210, 211]. Движение и излучение заряда в подобных полях рассматривалось в работах [212 — 217], где было показано при некоторых предположениях, что система на одной из частот вынужденно излучает. Различные методы расчета излучения электрона, движущегося в постоянном магнитном поле и неоднородном электрическом поле с потенциалом φ вида

$$e\varphi = \frac{m}{2} (\Omega_1^2 x^2 + \Omega_2^2 y^2) - \frac{m}{2} (\Omega_1^2 + \Omega_2^2) z^2,$$

были предложены в работах [216, 217].

Рассмотрим, следуя [217], движение электрона в скрещенных полях: однородном постоянном магнитном поле \mathbf{H} , направленном по оси z , векторный потенциал которого в калибровке Ландау имеет вид

$$\mathbf{A} = (0, Hx, 0), \quad \mathbf{H} = \text{const},$$

и неоднородном электрическом поле \mathbf{E} , потенциал которого равен φ . Гамильтониан электрона в этих полях записывается как

$$\mathcal{H} = \frac{\pi^2}{2m} - e\varphi = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - e\varphi \equiv \mathcal{H}_\perp + \mathcal{H}_z, \quad (2.1)$$

где \mathcal{H}_\perp — квадратичный гамильтониан вида

$$\mathcal{H}_\perp = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \Omega x p_y + \frac{m}{2} (\Omega^2 - \Omega_1^2) x^2 - \frac{m}{2} \Omega_2^2 y^2, \quad \Omega = \frac{cH}{m}; \quad (2.2)$$

$$\mathcal{H}_z = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega_3^2 z^2, \quad \omega_3 = \sqrt{\Omega_1^2 + \Omega_2^2}. \quad (2.3)$$

Считаем, что $\Omega > \Omega_1 + \Omega_2$; при этом движение будет устойчивым.

Гамильтонианы \mathcal{H}_\perp и \mathcal{H}_z коммутируют между собой и зависят от разных переменных; следовательно, волновую функцию гамильтониана \mathcal{H} можно представить в виде произведения волновых функций $\Psi(x, y)$ и $\Psi(z)$; \mathcal{H}_z — гамильтониан обычного линейного осциллятора, волновые функции которого хорошо известны [53]. Поэтому далее рассматривается лишь гамильтониан \mathcal{H}_\perp .

Введем бозонные операторы рождения и уничтожения:

$$\begin{aligned} a_1 &= \sqrt{m\sqrt{\Omega^2 - \Omega_1^2}/2} x + (i/\sqrt{2m\sqrt{\Omega^2 - \Omega_1^2}}) p_x; \\ a_2 &= \sqrt{m\Omega_2/2} y + (i/\sqrt{2m\Omega_2}) p_y; \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$[a_j, a_k] = [a_j^\dagger, a_k^\dagger] = 0; \quad [a_j, a_k^\dagger] = \delta_{jk}, \quad j, k = 1, 2.$$

Найдем два неэрмитовых интеграла движения A_j , $j = 1, 2$, которые удовлетворяют условиям

$$i \frac{\partial A_j}{\partial t} = [\mathcal{H}_\perp, A_j]; \quad (2.5)$$

$$[A_j, A_k^\dagger] = \delta_{jk}; \quad [A_j, A_k] = 0. \quad (2.6)$$

Для этого, следуя работам [218, 220, 221, 376], диагонализуем гамильтониан \mathcal{H}_1 с помощью линейного канонического преобразования над операторами a_j, a_j^\dagger , принадлежащего группе $\text{Sp}(4, R)$ [217]:

$$\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_1^\dagger \\ \xi_2 \\ \xi_2^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ u_{12}^* & u_{11}^* & u_{14}^* & u_{13}^* \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ u_{22}^* & u_{21}^* & u_{24}^* & u_{23}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_1^\dagger \\ a_2 \\ a_2^\dagger \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

где

$$\begin{aligned} u_{11} &= -\frac{\omega_1 + \sqrt{\Omega^2 - \Omega_1^2}}{2(\Omega^2 - \Omega_1^2)^{1/4}} \sqrt{\frac{\Omega}{\varepsilon_1(\omega_1^2 - \omega_2^2)}}; & u_{12} &= -\frac{\omega_1 - \sqrt{\Omega^2 - \Omega_1^2}}{2(\Omega^2 - \Omega_1^2)^{1/4}} \sqrt{\frac{\Omega}{\varepsilon_1(\omega_1^2 - \omega_2^2)}}; \\ u_{13} &= \frac{i}{2} \frac{\omega_1 - \Omega_2}{\omega_1} \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \Omega \Omega_2}{\omega_1^2 - \omega_2^2}}; & u_{14} &= -\frac{i}{2} \frac{\omega_1 + \Omega_2}{\omega_1} \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \Omega \Omega_2}{\omega_1^2 - \omega_2^2}}; \\ u_{21} &= -\frac{\omega_2 - \sqrt{\Omega^2 - \Omega_1^2}}{2(\Omega^2 - \Omega_1^2)^{1/4}} \sqrt{\frac{\Omega}{\varepsilon_2(\omega_1^2 - \omega_2^2)}}; & u_{22} &= \frac{\omega_2 + \sqrt{\Omega^2 - \Omega_1^2}}{2(\Omega^2 - \Omega_1^2)^{1/4}} \sqrt{\frac{\Omega}{\varepsilon_2(\omega_1^2 - \omega_2^2)}}; \\ u_{23} &= -\frac{i}{2} \frac{\omega_2 + \Omega_2}{\omega_2} \sqrt{\frac{\varepsilon_2 \Omega \Omega_2}{\omega_1^2 - \omega_2^2}}; & u_{24} &= \frac{i}{2} \frac{\omega_2 - \Omega_2}{\omega_2} \sqrt{\frac{\varepsilon_2 \Omega \Omega_2}{\omega_1^2 - \omega_2^2}}; \\ \omega_1 &= \frac{1}{2} (\sqrt{\Omega^2 - (\Omega_1 - \Omega_2)^2} + \sqrt{\Omega^2 - (\Omega_1 + \Omega_2)^2}); & & \\ \omega_2 &= \frac{1}{2} (\sqrt{\Omega^2 - (\Omega_1 - \Omega_2)^2} - \sqrt{\Omega^2 - (\Omega_1 + \Omega_2)^2}). & & \end{aligned} \quad (2.8)$$

Здесь и в дальнейшем используются обозначения

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \frac{\omega_1^2 + \Omega_1^2}{\omega_1 \Omega}; & \varepsilon_2 &= \frac{\omega_2^2 + \Omega_1^2}{\omega_2 \Omega}; \\ \varepsilon_3 &= \frac{2\Omega \sqrt{\Omega_1 \Omega_2}}{(\omega_1 + \omega_2)(\Omega_1 + \Omega_2)}; & \varepsilon_4 &= \frac{(\omega_1 - \omega_2)(\Omega_1 - \Omega_2)}{(\omega_1 + \omega_2)(\Omega_1 + \Omega_2)}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

причем при $\Omega_1 = \Omega_2$ имеем $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 1, \varepsilon_4 = 0$.

Искомые инварианты записываются как

$$A_1 = \xi_1 e^{i\omega_1 t}; \quad A_2 = \xi_2 e^{-i\omega_2 t}, \quad (2.10)$$

а гамильтониан (2.2) приводится к виду

$$\mathcal{H}_1 = \omega_1 (A_1^\dagger A_1 + 1/2) - \omega_2 (A_2^\dagger A_2 + 1/2), \quad (2.11)$$

т. е. энергия электрона принимает значения

$$E_{\perp n_1 n_2} = \omega_1(n_1 + 1/2) - \omega_2(n_2 + 1/2), \quad (2.12)$$

где $n_1, n_2 = 0, 1, 2, 3, \dots$

Состояние «вакуума» $|0, 0\rangle$ гамильтониана \mathcal{H}_{\perp} определяется как

$$A_1 |0, 0\rangle = A_2 |0, 0\rangle = 0. \quad (2.13)$$

Система (2.13) совместна, ее нормированное решение имеет вид

$$\begin{aligned} |0, 0\rangle = \\ = N \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[i(\omega_1 - \omega_2)t + m \frac{\omega_1 - \omega_2}{\Omega_1 + \Omega_2} \left(\Omega_1 x^2 + \Omega_2 y^2 + i \frac{2\Omega_1 \Omega_2}{\omega_1 - \omega_2} xy \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

где

$$N = \sqrt{\frac{m}{\pi} \frac{\omega_1 - \omega_2}{\Omega_1 + \Omega_2}} \sqrt[4]{\Omega_1 \Omega_2}.$$

Когерентные состояния $|\alpha_1, \alpha_2\rangle \equiv |\alpha_1^0, \alpha_2^0\rangle$ можно получить из состояния «вакуума» $|0, 0\rangle$ при помощи унитарных операторов Вейля [222]

$$\begin{aligned} D_j(\alpha_j) = \exp(\alpha_j^0 A_j^\dagger - \alpha_j^{0*} A_j) = \exp(\alpha_j \xi_j^\dagger - \alpha_j^* \xi_j); \\ |\alpha_1 \alpha_2\rangle = D_1(\alpha_1) D_2(\alpha_2) |0, 0\rangle; \end{aligned} \quad (2.15)$$

здесь α_1^0, α_2^0 — постоянные комплексные числа, а $\alpha_1 = \alpha_1^0 \exp(-i\omega_1 t)$, $\alpha_2 = \alpha_2^0 \exp(i\omega_2 t)$. Когерентные состояния $|\alpha_1^0, \alpha_2^0\rangle$ — собственные функции линейных инвариантов A_j :

$$A_j |\alpha_1^0, \alpha_2^0\rangle = \alpha_j^0 |\alpha_1^0, \alpha_2^0\rangle, \quad j = 1, 2, \quad (2.16)$$

и удовлетворяют уравнению Шредингера. Приведем выражение для когерентного состояния:

$$\begin{aligned} |\alpha_1, \alpha_2\rangle = \exp \left\{ -\frac{1}{2} (|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + \varepsilon_4(\alpha_1^2 - \alpha_2^2) + 2\varepsilon_3 \alpha_1 \alpha_2) - \right. \\ \left. - \sqrt{2m\Omega} \frac{\omega_1 - \omega_2}{\omega_1 + \omega_2} \frac{1}{\Omega_1 + \Omega_2} \left[\Omega_1 x \left(\frac{\alpha_1}{\sqrt{\varepsilon_1}} + \frac{\alpha_2}{\sqrt{\varepsilon_2}} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + i\Omega_2 y (\sqrt{\varepsilon_1} \alpha_1 - \sqrt{\varepsilon_2} \alpha_2) \right] \right\} |0, 0\rangle. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Когерентные состояния являются производящими для стационарных состояний $|n_1, n_2\rangle$:

$$|\alpha_1, \alpha_2\rangle = \exp \left[-\frac{1}{2} (|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2) \right] \sum_{n_1, n_2=0}^{\infty} \frac{\alpha_1^{n_1} \alpha_2^{n_2}}{\sqrt{n_1! n_2!}} |n_1, n_2\rangle, \quad (2.18)$$

где $|n_1, n_2\rangle$ — собственные состояния инвариантов $A_j^\dagger A_j$:

$$A_j^\dagger A_j |n_1, n_2\rangle = n_j |n_1, n_2\rangle, \quad j = 1, 2, \quad (2.19)$$

удовлетворяющие уравнению Шредингера и условию ортонормированности $\langle m_1, m_2 | n_1, n_2 \rangle = \delta_{n_1 m_1} \delta_{m_1 m_2}$. Дифференцируя (2.17) по α_1, α_2 , получаем выражение для $|n_1, n_2\rangle$:

$$|n_1, n_2\rangle = (n_1! n_2!)^{-1/2} |0, 0\rangle H_{n_1, n_2}(\eta_1, \eta_2); \quad (2.20)$$

здесь $H_{n_1, n_2}(\eta_1, \eta_2)$ — полином Эрмита от двух переменных [88, 223]:

$$\begin{aligned} \eta_1 &= -\sqrt{2m \frac{\Omega}{\varepsilon_1} \frac{\omega_1 - \omega_2}{\omega_1 + \omega_2} \frac{\Omega_1}{\Omega_1 + \Omega_2}} \left(x - \frac{i}{\varepsilon_2} y\right), \\ \eta_2 &= -\sqrt{2m \frac{\Omega}{\varepsilon_2} \frac{\omega_1 - \omega_2}{\omega_1 + \omega_2} \frac{\Omega_1}{\Omega_1 + \Omega_2}} \left(x + \frac{i}{\varepsilon_1} y\right). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Возможность диагонализации гамильтониана \mathcal{H}_\perp (см. (2.2)) каноническим преобразованием (2.7), принадлежащим группе $\text{Sp}(4, R)$, тесно связана с группой динамической симметрии гамильтониана \mathcal{H}_\perp . Явное выражение для \mathcal{H}_\perp (2.11) позволяет легко сконструировать группу динамической симметрии, являющуюся полупрямым произведением симплектической группы $\text{Sp}(4, R)$ на группу Гейзенберга $H(2)$. Эта группа как группа динамической симметрии N -мерного осциллятора и ее представления рассмотрена в работах [110, 201]. Генераторы группы $\text{Sp}(4, R) \wedge H(2)$ легко могут быть записаны через операторы ξ_j, ξ_j^\dagger в виде линейных и квадратичных выражений (см. [207, 217]). Стационарные состояния возникают при диагонализации операторов, принадлежащих компактной подалгебре, а когерентные — при диагонализации операторов, построенных из генераторов нормального делителя. Функция Грина системы является матричным элементом оператора этой динамической группы (см. [217]). Гамильтониан взаимодействия электрона с фотоном также принадлежит как в дипольном приближении, так и в общем случае динамической группе, что позволяет легко найти его матричные элементы в различных базисах в стационарных и когерентных состояниях.

Рассмотрим теперь однофотонные переходы в этой системе.

Гамильтониан взаимодействия с полем фотонов записывается в виде

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{e}{m} (A_2 \pi), \quad (2.22)$$

где A_2 — векторный потенциал поля излучения, который в шредингеровском представлении имеет вид

$$A_2 = \sum_{\lambda, \sigma} \sqrt{\frac{2\pi}{\omega_\lambda L^3}} e_{\lambda\sigma} [c_{\lambda\sigma} \exp(ik_\lambda r) + c_{\lambda\sigma}^\dagger \exp(-ik_\lambda r)]; \quad (2.23)$$

здесь $e_{\lambda 1}, e_{\lambda 2}$ — единичные векторы поляризации, а $c_{\lambda\sigma}$ и $c_{\lambda\sigma}^\dagger$ — операторы, подчиняющиеся бозонным коммутационным соотношениям. Оператор \mathcal{H}_{int} допускает представление вида (1.7) с током j вида (1.12).

Рассмотрим сначала в дипольном приближении индуцированное излучение электрона при переходе из когерентного состояния $|\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\rangle \equiv |\alpha_1, \alpha_2\rangle |\alpha_3\rangle$, где $|\alpha_3\rangle$ — когерентное состояние, отвечающее осцилляторному гамильтониану \mathcal{H}_z , а $\alpha_3 = \alpha_3^0 \exp(-i\omega_3 t)$, $\alpha_3^0 = \text{const}$, в состоянии $|\beta_1, \beta_2, \beta_3\rangle$.

Пусть начальное состояние электрона описывается матрицей плотности ρ_{in} , которая в P -представлении Глаубера [94] имеет вид

$$\rho_{\text{in}} = \int P_{\text{in}}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) |\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\rangle \langle \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3| \prod_{j=1}^3 d^2\alpha_j, \quad (2.24)$$

а конечное состояние описывается матрицей плотности ρ_{f} , отвечающей другой P -функции — P_{f} .

В случае неполяризованной падающей волны для вероятности вынужденного перехода с излучением фотона частоты ω_2 в интервале углов $d\sigma$ получим [217]

$$\begin{aligned} \frac{dw_{\text{ind}}^{\omega_2}}{d\sigma} &= \frac{2\pi^2 e^2 U(\omega_2)}{m\omega_2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} [(\omega_2^2 + \Omega_2^2)(1 - n_x^2) + (\omega_2^2 + \Omega_1^2)(1 - n_y^2)] \times \\ &\times \int P_{\text{in}}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) P_{\text{f}}(\beta_1, \beta_2, \beta_3) |\langle \beta_1, \beta_2, \beta_3 | \xi_2^\dagger | \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \rangle|^2 \prod_{j=1}^3 d^2\alpha_j d^2\beta_j, \end{aligned} \quad (2.25)$$

где \mathbf{n} — единичный вектор, направленный вдоль волнового вектора, а $U(\omega_2)$ — интенсивность падающего излучения на частоте ω_2 .

Индукцированное поглощение на частоте ω_2 дается формулой (2.25) с заменой ξ_2^\dagger на ξ_2 .

Окончательно суммарная мощность индуцированного излучения на частоте ω_2 равна

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{P}_{\text{ind}}^{\omega_2}}{d\sigma} &= \frac{2\pi^2 e^2 U(\omega_2)}{m(\omega_1^2 - \omega_2^2)} [(\omega_2^2 + \Omega_2^2)(1 - n_x^2) + (\omega_2^2 + \Omega_1^2)(1 - n_y^2)] \times \\ &\times \int P_{\text{in}}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) P_{\text{f}}(\beta_1, \beta_2, \beta_3) (|\beta_2|^2 - |\alpha_2|^2) \times \\ &\times \exp\left(-\sum_{j=1}^3 |\alpha_j - \beta_j|^2\right) \prod_{j=1}^3 d^2\alpha_j d^2\beta_j. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Отметим, что на частотах ω_1 и ω_2 происходит суммарное поглощение. Для частоты ω_1 , например, имеем

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{P}_{\text{ind}}^{\omega_1}}{d\sigma} &= \frac{2\pi^2 e^2 U(\omega_1)}{m(\omega_1^2 - \omega_2^2)} [(\omega_1^2 + \Omega_2^2)(1 - n_x^2) + (\omega_1^2 + \Omega_1^2)(1 - n_y^2)] \times \\ &\times \int P_{\text{in}}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) P_{\text{f}}(\beta_1, \beta_2, \beta_3) (|\alpha_1|^2 - |\beta_1|^2) \times \\ &\times \exp\left(-\sum_{j=1}^3 |\alpha_j - \beta_j|^2\right) \prod_{j=1}^3 d^2\alpha_j d^2\beta_j. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Спонтанное излучение на частоте ω_2 дается формулой (2.25) с заменой множителя $U(\omega_2)$, описывающего падающее излучение, на $\omega_2^3/(2\pi)^3$.

Общая формула (2.25) позволяет легко вычислить вероятность индуцированного излучения в том случае, когда начальное $|n_1, n_2, n_3\rangle$ и конечное $|m_1, m_2, m_3\rangle$ состояния системы стационарные. Подставляя в (2.27) выражения P_{in} и P_f , соответствующие стационарным состояниям, находим

$$\frac{dw_{ind}^{\omega_2}}{d\sigma} = \frac{2\pi^2 e^2 U(\omega_2)}{m\omega_2(\omega_1^2 - \omega_2^2)} [(\omega_2^2 + \Omega_2^2)(1 - n_x^2) + (\omega_2^2 + \Omega_1^2)(1 - n_y^2)] \times \\ \times (n_2 + 1) \delta_{m_1, n_1} \delta_{m_2, n_2+1} \delta_{m_3, n_3}. \quad (2.28)$$

Для вычисления спонтанного излучения электрона при переходах между стационарными состояниями в общем случае, когда экспоненциальным множителем в выражении для оператора взаимодействия пренебрегать нельзя, представим этот множитель как произведение вейлевских операторов сдвига D_j (2.15). Производя несложные алгебраические действия и используя формулы (2.4) и преобразование, обратное к (2.7), находим тождественно

$$\exp(-ik_\lambda r) = \prod_{j=1}^3 D_j(\Delta_j); \quad \xi_3 \equiv a_3, \quad (2.29)$$

где $D_j(\Delta_j)$ задаются (2.15), а параметры Δ_j равны

$$\Delta_j = -i \frac{u_{j_1} - u_{j_2}}{\sqrt{2m} \sqrt{\Omega^2 - \Omega_1^2}} k_{\lambda x} - i \frac{u_{j_3} - u_{j_4}}{\sqrt{2m\Omega_2}} k_{\lambda y} \quad (j = 1, 2); \\ \Delta_3 = -i \frac{k_{\lambda z}}{\sqrt{2m\omega_3}}. \quad (2.30)$$

Матричный элемент перехода M_j , описывающий излучение из начального состояния $|n_1, n_2, n_3\rangle$ (фотонов нет) в конечное состояние $|m_1, m_2, m_3\rangle$ (один фотон с частотой ω_λ , импульсом k_λ и вектором поляризации e_λ), дается формулой

$$M_j = \langle m_1, m_2, m_3 | (\tilde{e}_j \xi_j + \tilde{e}_j^* \xi_j^\dagger) \exp(-ik_\lambda r) | n_1, n_2, n_3 \rangle, \\ j = 1, 2, 3, \quad (2.31)$$

где

$$\tilde{e}_1 = i \sqrt{\frac{m}{2} \frac{\omega_1}{\omega_1^2 - \omega_2^2}} (\sqrt{\omega_1^2 + \Omega_2^2} e_{\lambda x} + i \sqrt{\omega_2^2 + \Omega_1^2} e_{\lambda y}); \\ \tilde{e}_2 = -i \sqrt{\frac{m}{2} \frac{\omega_2}{\omega_1^2 - \omega_2^2}} (\sqrt{\omega_2^2 + \Omega_2^2} e_{\lambda x} - i \sqrt{\omega_2^2 + \Omega_1^2} e_{\lambda y}); \quad (2.32) \\ \tilde{e}_3 = -i \sqrt{\frac{m}{2} \omega_3} e_{\lambda z}.$$

Учитывая действие бозонных операторов на стационарные волновые функции, а также используя тождество (2.29) и известную формулу для матричных элементов оператора D , имеем окончательно

$$M_j = (\tilde{\epsilon}_j \sqrt{m_j + 1} \mu_j^\dagger + \tilde{\epsilon}_j^* \sqrt{m_j} \mu_j^-) \Lambda_j,$$

где

$$\mu_j^\pm = (-1)^{(q_j \pm 1 - |q_j \pm 1|)/2} \frac{\sqrt{(m_j \pm 1)! n_j!}}{[(p_j \pm 1 + |q_j \pm 1|)/2]!} \exp\left(-\frac{1}{2} |\Delta_j|^2\right) \times \\ \times |\Delta_j|^{|q_j \pm 1|} \Delta_j^{(q_j \pm 1)/2} (\Delta_j^*)^{-(q_j \pm 1)/2} L_{(p_j \pm 1 - |q_j \pm 1|)/2}^{|q_j \pm 1|}(|\Delta_j|^2); \quad (2.33)$$

$$\Lambda_j = \prod_i' (-1)^{(q_i - |q_i|)/2} \frac{\sqrt{m_i! n_i!}}{[(p_i + |q_i|)/2]!} \exp\left(-\frac{1}{2} |\Delta_i|^2\right) |\Delta_i|^{|q_i|} \Delta_i^{q_i/2} \times \\ \times (\Delta_i^*)^{-q_i/2} L_{(p_i - |q_i|)/2}^{|q_i|}(|\Delta_i|^2), \quad p_i = m_i + n_i, \quad q_i = m_i - n_i, \quad (2.34)$$

а L_p^q — полиномы Лагерра; в произведении \prod_i' штрих означает, что множитель с $i = j$ должен быть опущен.

Вероятность спонтанного перехода в единицу времени с излучением фотона с импульсом k_λ , частотой ω_λ и поляризацией e_λ в интервале углов $d\omega$ дается формулой

$$\frac{dw_{\omega_\lambda}}{d\omega} = \frac{e^2 \omega_\lambda}{2\pi m^2} \left| \sum_{j=1}^3 M_j \right|^2,$$

где $\omega_\lambda = (n_1 - m_1)\omega_1 - (n_2 - m_2)\omega_2 + (n_3 - m_3)\omega_3$.

§ 3. Когерентные состояния заряженной частицы в полях волноводного типа

Рассмотрим частицу с зарядом e и массой m , движущуюся внутри волновода или резонатора, в котором возбуждены собственные электромагнитные колебания. Считаем, что волновод (или резонатор) помещен во внешние стационарные поля.

Поведение нерелятивистского заряда e в полях с векторным потенциалом A и скалярным потенциалом φ описывается уравнением Шредингера с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + e\varphi, \quad (3.1)$$

где $\mathbf{p} = -i\partial/\partial\mathbf{r}$ — оператор импульса частицы. Здесь и далее мы используем систему единиц, в которой $c = \hbar = 1$.

Векторный потенциал

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{A}_1(\mathbf{r}, t) \quad (3.2)$$

описывает поле, являющееся суперпозицией стационарного внеш-

него поля с векторным потенциалом A_0 и после электромагнитной волны, распространяющейся в волноводе (или резонаторе), с векторным потенциалом $A_1(\mathbf{r}, t)$.

Предполагается, что внутри волноводов и резонаторов — вакуум, а распространение волн не сопровождается затуханием.

При рассмотрении цилиндрических волноводов за ось z принимается направление образующей волновода. В комплексной форме записи фаза электромагнитной волны, распространяющейся вдоль оси z , определяется множителем $\exp[i(\omega t - k_z z)] \equiv \exp(i\tau)$, где $\mathbf{k} = (0, 0, k_z)$ — волновой вектор, а $\omega = |\mathbf{k}|$ — частота волны. Существуют некоторые минимальные значения частот ω_{\min} распространяющихся волн [224, 225].

В дальнейшем будем предполагать, что возбуждается колебание какой-либо одной моды. Такое предположение является вполне допустимым (см. [211]).

Так как комплексная напряженность электрического поля волны в волноводе или резонаторе экспоненциально зависит от времени:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0(\mathbf{r}) e^{i\omega t}, \quad (3.3)$$

то из уравнений Максвелла следует, что, выбирая для векторного потенциала A_1 , соответствующего этой напряженности, кулоновскую калибровку $\operatorname{div} A_1(\mathbf{r}, t) = 0$, получим

$$A_1(\mathbf{r}, t) = \operatorname{Re} \left[\frac{i}{\omega} E(\mathbf{r}, t) \right]. \quad (3.4)$$

Скалярный потенциал при этом равен нулю.

Волны в волноводах и резонаторах, как известно, бывают волнами электрического типа (в поле этих волн отсутствует компонента магнитного поля по оси z) и волнами магнитного типа.

Если частота изменения A_1 достаточно велика, то заряд движется по плавной траектории, заданной эффективными статическими полями, с небольшими осцилляциями около нее, вызываемыми высокочастотным полем волны. Тогда полезно воспользоваться методом усреднения Капицы [226]. При этом можно считать, что заряд движется в постоянных внешних полях и в поле с эффективным потенциалом Φ , который можно получить, усредняя по времени гамильтониан (3.1), описывающий движение заряда:

$$\Phi = \frac{e^2}{2m} \overline{A_1^2}(t), \quad (3.5)$$

где черта означает усреднение по времени:

$$\overline{A_1^2}(t) \equiv \frac{1}{T} \int_0^T A_1^2(\tau) d\tau, \quad T = \frac{2\pi}{\omega}. \quad (3.6)$$

Учитывая (3.4), формулу (3.5) можно переписать в виде

$$\Phi = \frac{e^2}{4m\omega^2} |E|^2, \quad (3.7)$$

что совпадает с выражением для эффективного потенциала, полученным классическим образом [227].

Выбирая в качестве внешнего поля постоянное однородное магнитное поле H с векторным потенциалом

$$A_0 = 1/2 [r \times H], \quad (3.8)$$

находим эффективный гамильтониан \mathcal{H} , описывающий движение ведущего центра орбиты заряда, в виде

$$\mathcal{H} = (p - eA_0)^2/2m + \Phi. \quad (3.9)$$

Точки, где напряженность электрического поля E равна нулю, являются положениями равновесия эффективного гамильтониана. В симметричном резонаторе (волноводе) это обычно центр (ось) симметрии. При рассмотрении ограниченных траекторий вблизи таких положений равновесия можно разложить потенциал $A_1(r, t)$ в ряд вблизи точки равновесия, ограничиваясь при этом только линейными членами. Тогда гамильтониан (3.9) будет квадратичной формой координат и импульсов вида

$$\mathcal{H}_B = QBQ, \quad (3.10)$$

где B — шестимерная вещественная симметричная матрица, которую, как и в гл. III, будем записывать в блочном виде:

$B = \begin{vmatrix} b_1 & b_2 \\ b_3 & b_4 \end{vmatrix}$, причем блок b_1 кратен единичной матрице: $b_1 = E/2m$; Q — шестимерный вектор, построенный из координат r и импульсов $p = -i\partial/\partial r$ по следующему правилу: $Q_j = p_j$, $Q_{3+j} = r_j$, $j = 1, 2, 3$. Явные выражения матрицы B для цилиндрических волноводов круглого, прямоугольного и эллиптического сечений и некоторых резонаторов приведены в [228] и [207].

Рассмотрению движения заряда в полях волноводного типа с различными гамильтонианами, являющимися частными случаями квадратичного гамильтониана (3.10), посвящена большая литература (см., например, [229—232] и [207], где имеется подробная библиография).

Для того чтобы можно было описывать движение частицы с гамильтонианом (3.10), необходимо, чтобы при правильно заданных начальных условиях вблизи оси волновода или центра резонатора траектория частицы не вышла за пределы областей, где справедлива аппроксимация точного гамильтониана \mathcal{H} (3.9) квадратичным \mathcal{H}_B (3.10). Таким образом, рассматривая движение заряда в параксиальном приближении, необходимо исследовать устойчивость движения заряда по оси волновода или устойчивость равновесного положения в резонаторе. Будем исследовать устойчивость классической системы, которая соответствует квантовой

с гамильтонианом (3.10), не зависящим от времени. При исследовании устойчивости будем использовать критерии устойчивости, полученные в работах [233—236], (см. также монографию [157], где содержится подробная библиография).

Классическая траектория в фазовом пространстве (p, q) находится из гамильтоновой системы уравнений

$$dQ/dt = 2\Sigma BQ, \quad (3.11)$$

отвечающей гамильтониану \mathcal{H} (3.10).

Фундаментальной системой решений (3.11) — ее матрицантом — является матрица

$$\Lambda^{-1}(t) = \exp(2\Sigma Bt). \quad (3.12)$$

Решение $Q(t)$ системы (3.11), проходящее через начальную точку $Q_0 = (q_0, p_0)$, дается выражением $Q(t) = \Lambda^{-1}(t)Q_0$. Матрица Λ^{-1} , ввиду симметричности B , является симплектической: $\Lambda^{-1}(t)\Sigma\tilde{\Lambda}^{-1}(t) = \Sigma$.

Как известно [157], для того чтобы решение $Q(t) \equiv 0$ системы (3.11) было устойчивым, необходимо и достаточно, чтобы матрица $\Lambda^{-1}(1)$ имела собственные значения μ_i , лежащие на единичной окружности $|\mu_i| = 1$, и ее можно было привести комплексным симплектическим преобразованием S к диагональному виду $\Lambda^{-1} = SDS^\dagger$, где $D = \|\delta_{ij}\mu_i\|$ [157]. Тем самым условия устойчивости точки $Q = 0$ налагают существенные ограничения на вид матрицы B . Однако этих ограничений на матрицу B еще недостаточно для рассмотрения движения в приближении \mathcal{H}_B . Квадратичный гамильтониан \mathcal{H}_B (3.10), записываемый с помощью матрицы B , является некоторой аппроксимацией точного гамильтониана \mathcal{H} (3.9). Естественно, что и любой квадратичный гамильтониан $\mathcal{H}_{B'}$ вида (3.10) с матрицей B' , близкой к матрице B , очевидно, тоже может рассматриваться как аппроксимация точного гамильтониана \mathcal{H} , и, следовательно, решение $Q \equiv 0$ должно быть устойчивым для всех B' , близких к B . В таком случае будем говорить, что \mathcal{H}_B — сильно устойчивый гамильтониан. Таким образом, для рассмотрения движения вблизи положения равновесия необходимо требовать, чтобы \mathcal{H}_B был сильно устойчивым гамильтонианом.

Критерий сильной устойчивости гамильтониана \mathcal{H}_B (теорема Крейна — Гельфанда — Лидского (см. [157])) состоит в том, что выполняются условия: все собственные значения μ_j матрицы $\Lambda(1)$ имеют вид $\mu_j = \exp\{\pm i\omega_j\}$, где $\omega_j > 0$, $j = 1, 2, \dots$ (среди ω_j могут быть равные). Матрица $\Lambda(1)$ имеет шесть различных собственных векторов:

$$\Lambda^{-1}(1)f^{(j)} = \mu_j f^{(j)}; \quad \Lambda^{-1}(1)f^{*(j)} = \mu_j^* f^{*(j)}, \quad j = 1, 2, 3, \quad (3.13)$$

и, следовательно, приводится к диагональному виду; кроме того сигнатура σ^j Крэйна

$$\sigma^j = i(f^{(j)}, \Sigma f^{*(j)}), \quad (3.14)$$

где $\Sigma = \begin{pmatrix} 0 & E \\ -E & 0 \end{pmatrix}$, $(f^{(1)}, f^{(2)})$ — скалярное произведение векторов, одна и та же для любых собственных векторов $f^{(j)}$, отвечающих одному и тому же собственному значению.

Как показано в [157], векторы $f^{(j)}$, отвечающие различным собственным значениям, ортогональны:

$$i(f^{(j)}, \Sigma f^{*(k)}) = 0, \quad k \neq j, \quad (3.15)$$

и могут быть нормированы условием

$$i(f^{(j)}, \Sigma f^{*(j)}) = \pm 1. \quad (3.16)$$

Рассмотрим теперь, следуя [228, 207], лишь случай устойчивого движения заряда. Тогда матрица $\Lambda^{-1}(1)$ имеет шесть корней вида $e^{\pm i\omega_j}$ ($\omega_j > 0$, $j = 1, \dots, 3$), три линейно независимых собственных вектора $f^{(j)}$, которые являются собственными и для матрицы $2B\Sigma$:

$$2B\Sigma f^{(j)} = i\omega_j f^{(j)}; \quad \Lambda^{-1}(1)f^{(j)} = e^{i\omega_j} f^{(j)}, \quad (3.17)$$

и три линейно независимых собственных вектора $f^{(3+j)} \equiv f^{*(j)}$.

Считаем, что собственные векторы $f^{(j)}$ нормированы следующим образом:

$$(f^{(j)}, \sigma_2 f^{*(k)}) = 0, \quad j \neq k; \quad (f^{(j)}, \sigma_2 f^{*(j)}) = \pm 1, \quad \sigma_2 = i\Sigma. \quad (3.18)$$

Введем, используя сигнатуру σ_j , векторы $F^{(j)}$ и $F^{*(j)} \equiv F^{(3+j)}$. Пусть

$$F^{(j)} = \begin{cases} f^{(j)}, & \text{если } \sigma^{(j)} > 0; \\ f^{(3+j)}, & \text{если } \sigma^{(j)} < 0, \end{cases} \quad (3.19)$$

где $\sigma^{(j)} = (f^{(j)}, \sigma_2 f^{*(j)})$, и частоты Ω_j равны

$$\Omega_j = \omega_j \text{sign } \sigma^{(j)} = \omega_j \text{sign } (f^{(j)}, \sigma_2 f^{*(j)}). \quad (3.20)$$

Запишем соотношение (3.17) в матричной форме в обозначениях (3.19):

$$2F\sigma_2 B = \Omega F, \quad (3.21)$$

или

$$\exp \{2tB\Sigma\} \tilde{F} = \tilde{F} \exp \{i\Omega t\}, \quad (3.22)$$

где

$$F = \begin{vmatrix} F_1^{(1)} & F_2^{(1)} & \dots & F_6^{(1)} \\ F_1^{(2)} & F_2^{(2)} & \dots & F_6^{(2)} \\ F_1^{(3)} & F_2^{(3)} & \dots & F_6^{(3)} \\ F_1^{*(1)} & F_2^{*(1)} & \dots & F_6^{*(1)} \\ F_1^{*(2)} & F_2^{*(2)} & \dots & F_6^{*(2)} \\ F_1^{*(3)} & F_2^{*(3)} & \dots & F_6^{*(3)} \end{vmatrix} \equiv \begin{vmatrix} F_1 & F_2 \\ F_1^* & F_2^* \end{vmatrix}; \quad (3.23)$$

$$\Omega = \begin{vmatrix} \Omega_1 & & & 0 \\ & \Omega_2 & & \\ & & \Omega_3 & \\ & & & -\Omega_1 \\ 0 & & & & -\Omega_2 \\ & & & & & -\Omega_3 \end{vmatrix} \equiv \begin{vmatrix} \Omega_j & 0 \\ 0 & -\Omega_j \end{vmatrix}. \quad (3.24)$$

Построим шесть неэрмитовых операторов — интегралов движения $A_j(t)$, $A_j^\dagger(t)$ — для системы с гамильтонианом (3.10):

$$i \frac{\partial A_j(t)}{\partial t} + [A_j(t), \mathcal{H}] = 0, \quad (3.25)$$

удовлетворяющих бозонным перестановочным соотношениям

$$[A_j, A_k^\dagger] = \delta_{jk}; \quad [A_j, A_k] = 0.$$

Можно проверить, используя (3.12), (3.17) и (3.21), что интегралы имеют вид

$$A_j(t) = e^{i\Omega_j t} \xi_j, \quad (3.26)$$

где операторы ξ_j равны

$$\begin{pmatrix} \xi \\ \xi^\dagger \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} F_1 & F_2 \\ F_1^* & F_2^* \end{vmatrix} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Интегралы движения (3.26) диагонализуют гамильтониан (3.10):

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^3 \Omega_j (A_j^\dagger A_j + A_j A_j^\dagger). \quad (3.28)$$

Аналогичная диагонализация гамильтониана с помощью интегралов движения была применена для расчета излучения заряда в скрещенных полях [217]. Вопросам диагонализации квадратичных гамильтонианов посвящены работы [219—221] (см. также [218]).

Когерентные состояния строим как собственные функции операторов $A_j(t)$:

$$A_j(t) | \alpha; t \rangle = \alpha_j | \alpha; t \rangle, \quad (3.29)$$

или $\xi_j | \alpha; t \rangle = \alpha_j(t) | \alpha; t \rangle$, $\alpha_j(t) \equiv \alpha_j e^{-i\Omega_j t}$.

Рассмотрим теперь фоковские состояния $|n\rangle$, являющиеся собственными для операторов

$$A_j^\dagger A_j |n\rangle = n_j |n\rangle. \quad (3.30)$$

Фоковские состояния $|n\rangle$ образуют полную ортогональную систему $\langle n_i | n_j \rangle = \delta_{ij}$.

Когерентные состояния $|\alpha; t\rangle$ могут быть использованы как производящие функции для фоковских состояний $|n\rangle$:

$$|\alpha; t\rangle = \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}\right) \sum_{n_j=0}^{\infty} \frac{\alpha_1^{n_1} \alpha_2^{n_2} \alpha_3^{n_3}}{\sqrt{n_1! n_2! n_3!}} |n\rangle. \quad (3.31)$$

Из (3.30) следует, что фоковские состояния $|n\rangle$ являются стационарными состояниями гамильтониана (3.28) и спектр энергий имеет вид

$$E_n = \Omega_1(n_1 + 1/2) + \Omega_2(n_2 + 1/2) + \Omega_3(n_3 + 1/2). \quad (3.32)$$

Из выражения (3.32) видно, что если имеются $\Omega_j < 0$, то при устойчивом движении мы получаем неограниченный снизу спектр. Системы с таким спектром рассматривались в работах [212—217].

Явный вид когерентных и стационарных волновых функций приведен в [190].

§ 4. Излучение заряда в полях волноводного типа

В настоящем параграфе рассмотрим, следуя [230, 207], излучение заряженной частицы в волноводе или резонаторе [211], помещенном во внешнее стационарное поле.

Если частота волны, распространяющейся в волноводе, достаточно велика, то приближенно можно описать поведение заряда в волноводе или резонаторе квадратичным стационарным гамильтонианом с эффективным потенциалом Φ . Оказывается [228], что имеется класс систем, в которых существует эффект вынужденного излучения на одной из частот. Впервые подобное усиление внешней падающей волны при движении электрона в стационарных скрещенных полях было рассчитано в работе [212]. Эффект вынужденного излучения стационарными квантовыми системами рассматривался также в работах [213 — 217]. Отметим, что классические стационарные системы волноводного типа рассматривались в [237]. Спектр излучения систем с эквидистантным энергетическим спектром рассматривался в [238].

Рассмотрим излучение системы с гамильтонианом (3.10). Гамильтониан взаимодействия системы с полем излучения в первом порядке по заряду получается, как обычно, из (3.10) путем замены в (3.10) p на $p - eA_2$, где A_2 — векторный потенциал поля излучения вида (1.8). В дипольном приближении \mathcal{H}_{int} запишем в виде

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = -e(QBA + ABQ), \quad (4.1)$$

где шестимерный вектор \mathbf{A} выражается через векторный потенциал поля излучения \mathbf{A}_2 как $\mathbf{A} = (A_{2x}, A_{2y}, A_{2z}, 0, 0, 0)$.

Следуя общей схеме § 1, запишем гамильтониан взаимодействия системы (4.1) с полем излучения в дипольном приближении через интегралы движения $A_j(t)$ и $A_j^\dagger(t)$ в виде (1.7):

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \mathbf{A}_2 \mathbf{j}. \quad (4.2)$$

Ток \mathbf{j} имеет вид (1.12), т. е. выражается через $\mathbf{A}(t)$ и $\mathbf{A}^\dagger(t)$:

$$\mathbf{j} = -eF_1 \Omega_s e^{-i\Omega_s t} \mathbf{A}(t) - eF_{-1} \Omega_s e^{i\Omega_s t} \mathbf{A}^\dagger(t), \quad (4.3)$$

где матрицы F_1 и Ω_s даются формулами (3.23) и (3.24), а интегралы движения \mathbf{A} и \mathbf{A}^\dagger — (3.26).

Будем рассматривать дипольные переходы между когерентными состояниями $|\alpha; t\rangle$ и $|\beta; t\rangle$ с излучением фотона с частотой ω_λ и вектором поляризации e_λ . Суммировать по начальным и усреднять по конечным состояниям будем с помощью матриц плотности ρ_{in} и ρ_{f} , которые записываются в P -представлении Глаубера [94] в виде

$$\rho_{\text{in}} = \int P_{\text{in}}(\alpha) d\alpha \quad (4.4)$$

и

$$\rho_{\text{f}} = \int P_{\text{f}}(\beta) d\beta, \quad (4.5)$$

где $d\alpha = \prod_j d(\text{Re } \alpha_j) d(\text{Im } \alpha_j)$.

Энергия \mathcal{P} , излучаемая в единичный телесный угол в направлении \mathbf{n}_k (\mathbf{n}_k — единичный вектор, направленный вдоль \mathbf{k}_λ) в частотном интервале $d\omega_\lambda$, равна

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\mathbf{n}_k, \omega_\lambda, e_\lambda) &= \sum_{j=1}^3 \frac{e^2 \omega_\lambda^2}{2\pi} \int d\alpha d\beta P_{\text{in}}(\alpha) P_{\text{f}}(\beta) \times \\ &\times \exp(-|\alpha - \beta|^2 \Omega_j^2 |\chi^{(j)} e_\lambda|^2 [|\alpha_j|^2 \delta(\Omega_j - \omega_\lambda) + |\beta_j|^2 \delta(\Omega_j + \omega_\lambda)]), \end{aligned} \quad (4.6)$$

где вектор $\chi^{(j)}$ есть j -я строка матрицы F_1 . Отметим, что для $\Omega_j > 0$ остается первый член в квадратной скобке выражения (4.6), а для $\Omega_j < 0$ — второй член.

Выражения для мощности излучения при переходах между стационарными состояниями можно получить из выражений для переходов между когерентными состояниями, учитывая, что матричные элементы последних служат производящими функциями для матричных элементов переходов между стационарными состояниями. Можно непосредственно использовать (4.2) и (4.3).

В случае различных частот Ω_j для спонтанных переходов $|n\rangle \rightarrow |m\rangle$, где $m_j \neq n_j$, $m_k = n_k$, $k \neq j$, имеем

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\mathbf{n}_k, \omega_\lambda, e_\lambda) = \\ = \sum_{j=1}^3 \frac{e^2 \Omega_j^4}{2\pi} |\chi^{(j)} e| ^2 [n_j \delta_{n_j-1, m_j} \delta(\Omega_j - \omega_\lambda) + (n_j + 1) \delta_{n_j+1, m_j} \delta(\Omega_j + \omega_\lambda)]. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Для перехода к классическим формулам излучения выберем в качестве начального состояния системы когерентное состояние $|\alpha_0\rangle$, максимально близко описывающее начальное классическое состояние с \mathbf{p}_0 и \mathbf{r}_0 . Таким образом, положим $P_{in} = \delta(\alpha - \alpha_0)$, причем

$$\alpha_0 = F_1 p_0 + F_2 r_0, \quad (4.8)$$

где \mathbf{r}_0 и \mathbf{p}_0 — начальные классические координаты и импульсы. Усреднение по конечным состояниям выполним с матрицей плотности вида $P_{fl} \pi^{-3}$. Тогда выражение для мощности (4.7) принимает вид

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\mathbf{n}_k, \omega_\lambda, e_\lambda) = \\ = \sum_{j=1}^3 \frac{e^2 \Omega_j^4}{2\pi} |\chi^{(j)} e_{k\lambda}| ^2 [|\alpha_{0j}|^2 \delta(\Omega_j - \omega_\lambda) + (|\alpha_{0j}|^2 + 1) \delta(\Omega_j + \omega_\lambda)]. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Для излучения на частотах $\Omega_j > 0$ из (4.9) получаем классическое выражение для мощности излучения (см. [228])

$$\mathcal{P}(\mathbf{n}_k, \omega_\lambda, e_\lambda) = \sum_{j=1}^3 \frac{e^2 \Omega_j^4}{2\pi} |\chi^{(j)} e_{k\lambda}| ^2 |\alpha_{0j}|^2. \quad (4.10)$$

Если рассматривается излучение на частотах $\Omega_j < 0$, то классическое выражение для мощности излучения получается из (4.10) при $|\alpha_{0j}|^2 \gg 1$.

Парадокс гармонического осциллятора состоит в том, что вероятность перехода между стационарными состояниями растет пропорционально n_j (см. [239]). Ширина же линии, возникающей при излучении волнового пакета — когерентного состояния, — совпадает с классической (см. [228]). Таким образом, при излучении волнового пакета — когерентного состояния — происходит интерференционное сужение линии, которое приводит к совпадению классического и квантового расчетов.

При рассмотрении вынужденного излучения полагаем, что волна, индуцирующая переходы, слабая и ее можно считать квантованной плоской волной. Тогда, чтобы получить мощность индуцированного излучения, в приведенных выше выражениях для спонтанных переходов необходимо сделать замену $(\omega_\lambda / 2\pi)^3 \rightarrow$

$\rightarrow U(\omega_\lambda)$, где $U(\omega_\lambda)$ — интенсивность падающего излучения на частоте ω_λ . Чтобы получить мощность индуцированного поглощения, нужна замена $(\omega_\lambda / 2\pi)^3 \rightarrow -U(\omega_\lambda)$, а в δ -функциях $\omega_\lambda \rightarrow -\omega_\lambda$. Интересен суммарный эффект обоих процессов — индуцированного поглощения и индуцированного излучения. Из приведенных выше формул, как для переходов между когерентными состояниями (4.6), так и для разрешенных переходов между стационарными состояниями (4.7), получим для суммарной мощности всех индуцированных процессов следующее выражение:

$$\sum_{j=1}^3 \mathcal{P}(n_k, \omega_j, e_\lambda) = - \sum_{j=1}^3 4\pi^2 e^2 U(\omega_j) \Omega_j |\chi^{(j)} e|^2. \quad (4.11)$$

Таким образом, из (4.11) следует, что если $(f^{(j)}, \sigma_2 f^{*(j)}) > 0$, то на частотах $\Omega_j > 0$ (см. (3.20)) суммарным эффектом является вынужденное поглощение, а если $(f^{(j)}, \sigma_2 f^{*(j)}) < 0$, то $\Omega_j < 0$ и на частотах $|\Omega_j|$ суммарный эффект — вынужденное излучение.

Классическое рассмотрение процесса вынужденного излучения приводит в силу формул (4.9) и (4.10), в которых необходимо выполнить соответствующие замены, к тем же самым эффектам, что и квантовое рассмотрение.

Как уже указывалось, системы с эффектом индуцированного излучения рассматривались в работах [212—217, 207]. Отметим, что гамильтонианы типа (3.10) с эффектом индуцированного излучения описывают поведение электрона, например, в цилиндрическом волноводе, помещенном во внешнее магнитное поле \mathbf{H} , направленное по оси z , когда в волноводе возбуждена волна ТН-типа достаточно большой частоты с $m = 1$. Аналогичными гамильтонианами описывается поведение электрона в целом ряде других систем волноводного типа (см. [228, 207]).

§ 5. Излучение заряженной частицы, находящейся в периодическом, зависящем от времени внешнем поле

В этом параграфе рассмотрим излучение заряда, находящегося в периодически изменяющемся во времени электромагнитном поле, заданном векторным потенциалом

$$\mathbf{A}(t) = [\mathbf{H}(t) \times \mathbf{r}] / 2, \quad \mathbf{A}(T + t) = \mathbf{A}(t), \quad (5.1)$$

где $\mathbf{H}(t) = \{0, 0, H(t)\}$ — периодическое магнитное поле, направленное по оси z , $\omega_0 = 2\pi / T$.

Гамильтониан заряда в поле (5.1)

$$\mathcal{H} = (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 / 2m \quad (5.2)$$

можно записать в виде $\mathcal{H} = \mathcal{H}_\perp + p_z^2 / 2m$. Движение по оси z — свободное. Гамильтониан \mathcal{H}_\perp , описывающий движение в

плоскости x, y , имеет вид

$$\mathcal{H}_\perp = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{\Omega^2}{8}(x^2 + y^2) + \frac{\Omega}{2}(yp_x - xp_y),$$

$$\Omega(t) = \frac{eH(t)}{m},$$
(5.3)

где p_x, p_y — операторы проекций импульса частицы; e, m — соответственно ее заряд и масса. (Здесь и далее мы используем систему единиц, в которой $c = \hbar = 1$.)

В случае произвольной зависимости векторного потенциала A от времени переходы с излучением фотона в поле вида (5.1) рассматривались в [240]. Спектр квазиэнергий, когерентные и квазиэнергетические состояния заряда во внешнем поле (5.1) были получены в § 8 гл. V.

Следуя [241], рассмотрим процессы излучения и поглощения фотонов зарядом при переходах между КЭС дискретного спектра.

Гамильтониан взаимодействия заряда с полем излучения получаем из гамильтониана \mathcal{H} с помощью замены $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - e\mathbf{A}_2$, где \mathbf{A}_2 — векторный потенциал поля излучения (1.8). Гамильтониан взаимодействия \mathcal{H}_{int} в первом порядке по заряду в дипольном приближении имеет вид

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = - \sum_{\lambda, \sigma} \sqrt{\frac{2\pi}{L^3 \omega_\lambda}} (c_{\lambda\sigma} + c_{\lambda\sigma}^\dagger) (e_{\lambda\sigma} \mathbf{j}),$$
(5.4)

где $c_{\lambda\sigma}^\dagger (c_{\lambda\sigma})$ — операторы рождения (уничтожения) фотона с частотой ω_λ , вектором поляризации $e_{\lambda\sigma}$ и волновым вектором k_λ ; ток

$$\mathbf{j} = - \frac{e}{m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A}(t)).$$
(5.5)

Гамильтониан \mathcal{H}_\perp обладает в случае дискретного спектра КЭ четырьмя интегралами движения: $A(t), B(t), A^\dagger(t), B^\dagger(t)$, явное выражение для которых дается формулами (8.7) гл. V, в которых нужно заменить ζ на $u = - \sqrt{\frac{m}{2}} (x + iy) \exp\left(\frac{i}{2} \int_0^t \Omega d\tau\right)$.

Интегралы $A(t)$ и $B(t)$ удовлетворяют условиям

$$A(t+T) = e^{i\kappa_a T} A(t); \quad B(t+T) = e^{i\kappa_b T} B(t),$$
(5.6)

где κ_a и κ_b даются формулами (8.11) гл. V.

Используя явные выражения для интегралов движения, ток \mathbf{j} можно представить в виде (1.12). Ограничимся случаем, когда фотон излучается параллельно плоскости x, y (т. е. $e_{\lambda z} = 0$). Такое ограничение несущественно, так как движение по оси z свободное — в конечном выражении для мощности излучения член, зависящий от $e_{\lambda z}$, выпадает.

Выразим гамильтониан взаимодействия (5.4) через интегралы движения A , B , A^\dagger , B^\dagger в виде

$$\mathcal{H}_{\text{int}} =$$

$$= -\frac{e}{2\sqrt{m}} \sum_{\sigma, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi}{L^3\omega}} (c_{k\lambda} + c_{k\lambda}^\dagger) (j_1 A + j_2 B + j_1^* A^\dagger + j_2^* B^\dagger), \quad (5.7)$$

где

$$j_1(t) = (e_{\lambda y} + ie_{\lambda x})\sigma_1(t); \quad j_2(t) = (e_{\lambda x} + ie_{\lambda y})\sigma_2(t);$$

$$\sigma_j(t) = \left[\varepsilon^* + (-1)^j \frac{i}{2} \Omega \varepsilon^* \right] \exp \left[(-1)^j \frac{i}{2} \int_0^t \Omega d\tau \right]; \quad (5.9)$$

$e_{\lambda x}$ и $e_{\lambda y}$ — проекции вектора поляризации e_λ на оси x и y .

Так как $\varepsilon(t)$ удовлетворяет условию (8.9) гл. V, а $\Omega(t) = \Omega(t+T)$, то функции $\sigma_j(t)$, $j = 1, 2$, можно разложить в ряд Фурье:

$$\sigma_j(t) = e^{-i\kappa_j t} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sigma_j(l) e^{i2\pi l t/T}, \quad (5.10)$$

причем

$$\sigma_j(l) = \frac{1}{T} \int_0^T \sigma_j(\tau) \exp[(i\kappa_j - \omega_0 l)\tau] d\tau, \quad \omega_0 = \frac{2\pi}{T}. \quad (5.11)$$

Рассмотрим теперь переходы между когерентными и квази-энергетическими состояниями системы (см. (4.12) и (8.12) гл. V) с излучением или поглощением фотона. При рассмотрении излучения будем полагать, что

$$\kappa_j \neq k\omega_0, \quad k = \pm 1, \pm 2, \dots$$

Так как гамильтониан \mathcal{H}_{int} (5.7) имеет вид (1.7) с j вида (1.13), то амплитуды переходов с излучением фотона при переходах между когерентными или фоковскими состояниями находятся аналогично (1.18) и (1.24).

Найдем теперь мощность \mathcal{P} , излучаемую при дипольных спонтанных переходах заряда из когерентного состояния $|\alpha, t\rangle$ в состояние $|\beta, t\rangle$. Пусть излучаемый фотон имеет частоту ω , вектор поляризации e_λ (считаем, что $e_{\lambda z} = 0$) и волновой вектор k . Тогда для мощности излучения $\mathcal{P}(\omega, \mathbf{n}, e_\lambda)$ в единичный телесный угол в направлении $\mathbf{n} = k_\lambda / |k_\lambda|$ в частотном интервале $d\omega$ получим, согласно [241], выражение

$$\mathcal{P}(\omega, \mathbf{n}, e_\lambda) = \frac{e^2 \omega^2}{4\pi} \int d^2\alpha d^2\beta P_{\text{in}}(\alpha) P_{\text{f}}(\beta) \times$$

$$\times \exp(-|\alpha - \beta|^2) \sum_{j=1}^2 \sum_{l=-\infty}^{\infty} |\sigma_j(l)|^2 [|\alpha_j|^2 \delta(\omega_0 l - \kappa_j + \omega) +$$

$$+ |\beta_j|^2 \delta(\omega_0 l + \kappa_j + \omega)] \quad (5.12)$$

$$(e_\lambda^2 \equiv e_{\lambda x}^2 + e_{\lambda y}^2 = 1, \quad \omega_0 = 2\pi/T),$$

где усреднение по начальным когерентным состояниям и суммирование по конечным когерентным состояниям проведено при помощи матриц плотности ρ_{in} , ρ_f , взятых в P -представлении Глаубера (см. [94] и (2.24)).

Полагая в (5.12) $P_{in}(\alpha - \alpha_0)$, $P_f = \pi^{-2}$, получим

$$\mathcal{P}(\omega, \mathbf{n}, e_\lambda) = \frac{e^2 \omega^2}{2m} \sum_{j=1}^2 \sum_{l=-\infty}^{\infty} |\sigma_j(l)|^2 [|\alpha_{j0}|^2 \delta(\omega_0 l - \kappa_j + \omega) + (|\alpha_{j0}|^2 + 1) \delta(\omega_0 l + \kappa_j + \omega)]. \quad (5.13)$$

В приближении $|\alpha_{j0}| \gg 1$ выражение (5.13) переходит в классическое, если положить, согласно работе [240],

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= [\varepsilon(0)(p_{x0} + ip_{y0}) - \dot{\varepsilon}(0)(x_0 + iy_0)]/2\sqrt{m}; \\ \alpha_2 &= [\varepsilon(0)(p_{y0} + ip_{x0}) - \dot{\varepsilon}(0)(y_0 + ix_0)]/2\sqrt{m}; \end{aligned} \quad (5.14)$$

здесь \mathbf{r}_0 и \mathbf{p}_0 — соответственно начальные координаты и начальный обобщенный импульс частицы.

Для мощности спонтанного излучения при переходах, аналогично (5.12), получим

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\omega, \mathbf{n}, e_\lambda) &= \frac{e^2 \omega^2}{2m} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \{ |\sigma_1(l)|^2 \delta_{n_2, m_2} [n_1 \delta_{n_1-1, m_1} \delta(\kappa_1 - \omega_0 l - \omega) + \\ &+ (n_1 + 1) \delta_{n_1+1, m_1} \delta(\kappa_1 + \omega_0 l + \omega)] + |\sigma_2(l)|^2 \times \\ &\times \delta_{n_1, m_1} [n_2 \delta_{n_2-1, m_2} \delta(\kappa_2 - \omega_0 l - \omega) + (n_2 + 1) \delta_{n_2+1, m_2} \delta(\kappa_2 + \omega_0 l + \omega)] \}. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Из выражения (5.15) видно, что переход между квазиэнергетическими состояниями $|\mathbf{n}, t\rangle \rightarrow |\mathbf{m}, t\rangle$ дает не одну линию, а серию линий (см. [175, 176]), так как квазиэнергия определена по модулю ω_0 .

Отметим, что впервые спектр излучения при переходах между КЭС был найден Блохинцевым [171] при рассмотрении эффекта Штарка в переменном электрическом поле. При этом нельзя сказать, какое из состояний: $|\mathbf{n}, t\rangle$ или $|\mathbf{m}, t\rangle$ — обладает большей квазиэнергией. Поэтому, в отличие от стационарного случая, возможны как переходы $|\mathbf{n}, t\rangle \rightarrow |\mathbf{m}, t\rangle$, так и переходы $|\mathbf{m}, t\rangle \rightarrow |\mathbf{n}, t\rangle$.

Рассмотрим теперь индуцированные переходы. Будем считать, что индуцирующая внешняя волна с интенсивностью $U(\omega)$ монохроматична и имеет какую-либо одну частоту ω . Происходят переходы как с индуцированным излучением, так и с индуцированным поглощением. Интересен суммарный эффект обоих этих процессов [228, 241].

Для переходов $|n_1, n_2, t\rangle \rightarrow |m_1, n_2, t\rangle$ излучаемая суммарная мощность определяется как

$$\mathcal{P}^{\text{sum}}(\omega^{(1)}, \mathbf{n}, e_\lambda) = \frac{4\pi^3 e^2}{m\omega^{(1)}} U(\omega^{(1)}) |\sigma_1(l^{(1)})|^2, \quad (5.16)$$

где

$$\omega^{(1)} = \omega_0 l^{(1)} - \kappa_1 > 0, \quad -\infty < l^{(1)} < \infty; \quad (5.17)$$

при этом $l^{(1)}$ подбираются так, чтобы $\omega^{(1)} > 0$. Поглощаемая суммарная мощность равна

$$\mathcal{P}^{\text{sum}}(\omega^{(2)}, \mathbf{n}, e_\lambda) = -\frac{4\pi^3 e^3}{m\omega^{(1)}} U(\omega^{(2)}) |\sigma_1(l^{(2)})|^2, \quad (5.18)$$

где

$$\omega^{(2)} = \kappa_1 - \omega_0 l^{(2)} > 0, \quad -\infty < l^{(2)} < \infty. \quad (5.19)$$

Аналогичные соотношения получаем для переходов $|n_1, n_2, t\rangle \rightarrow |n_1, m_2, t\rangle, n_2 \neq m_2$:

$$\mathcal{P}^{\text{sum}}(\omega^{(3)}, \mathbf{n}, e_\lambda) = \frac{4\pi^3 e^2}{m\omega^{(3)}} U(\omega^{(3)}) |\sigma_2(l^{(3)})|^2, \quad (5.20)$$

где

$$\omega^{(3)} = \omega_0 l^{(3)} - \kappa_2 > 0, \quad -\infty < l^{(3)} < \infty, \quad (5.21)$$

и

$$\mathcal{P}^{\text{sum}}(\omega^{(4)}, \mathbf{n}, e_\lambda) = -\frac{4\pi^3 e^2}{m\omega^{(4)}} U(\omega^{(4)}) |\sigma_2(l^{(4)})|^2, \quad (5.22)$$

где

$$\omega^{(4)} = \kappa_2 - \omega_0 l^{(4)} > 0, \quad -\infty < l^{(4)} < \infty. \quad (5.23)$$

Если рассматриваемая система имеет отрицательные κ_j , то из выражений (5.16), (5.17), (5.20) и (5.21) следует, что внешнее излучение будет усиливаться уже на основной частоте κ_j . Из этих выражений видно также, что, каковы бы ни были κ_j : положительные или отрицательные, всегда найдется такой номер гармоники $l^{(1)}$ или $l^{(3)}$, начиная с которого система работает как усиливающее устройство. На возможность эффекта усиления падающей радиации системами с периодическим во времени гамильтонианом было указано в [242, 243].

Динамическая симметрия вибронных переходов многочастицы молекулы

§ 1. Введение

При описании молекулярных систем используют обычно адиабатическое приближение, следуя классической работе Борна и Опенгеймера [245]. Параметром адиабатичности при описании взаимодействия электронов и ядер в молекуле служит величина $\kappa = \sqrt[4]{m_e/M}$, где m_e — масса электрона, M — средняя масса ядра в молекуле. Полная волновая функция $\Psi(r, q)$ молекулы удовлетворяет уравнению Шредингера $\hat{\mathcal{H}}\Psi = E\Psi$, причем r означает совокупность координат электронов, а q — ядер. Оператор Гамильтона \mathcal{H} равен

$$\mathcal{H} = T_e + T_N + U(r, q), \quad (1.1)$$

где T_e и T_N — операторы кинетической энергии электронов и ядер, $U(r, q)$ — полная потенциальная энергия. Так как периоды колебаний ядер в молекуле около равновесных положений много больше характерных времен движения электронов, то можно описывать движение электронов в поле зафиксированной конфигурации ядер. Полная энергия электронов, зависящая при этом от конфигурации ядер, является эффективной потенциальной энергией, в поле которой колеблются ядра.

Таким образом, в приближении Борна — Опенгеймера [245] полную волновую функцию молекулы $\Psi(r, q)$ можно представить в виде произведения электронной волновой функции $\varphi_n(r, q)$ и волновой функции, зависящей только от координат ядер $\Psi_{vn}(q)$. Эти волновые функции удовлетворяют системе уравнений

$$[T_e + U(r, q)]\varphi_n(r, q) = V_n(q)\varphi_n(r, q); \quad (1.2a)$$

$$[T_N + V_n(q)]\Psi_{vn}(q) = E_{vn}\Psi_{vn}(q), \quad (1.2b)$$

где $V_n(q)$ — электронный терм при заданной конфигурации ядер. Энергия движения ядер E_{vn} зависит, таким образом, как от набора колебательных квантовых чисел ν , так и от электронного термина. В работе Борна [247], на основании точного уравнения (1.1), путем разложения по параметру адиабатичности κ в качестве нулевого приближения была получена система вида (1.2), где в уравнении (1.2b) вместо $V_n(q)$ стоит эффективная потенци-

альная энергия $U_{\text{eff}} = V_n(q) + \langle T_n \rangle$ (здесь скобки означают усреднение по электронному состоянию φ_n).

Вопросы, связанные с применимостью адиабатического приближения и его нарушением, обсуждаются в работах [248—250].

Обычно полную волновую функцию Ψ записывают в так называемом грубом адиабатическом приближении. При этом в электронной волновой функции координаты ядер q заменяют их равновесным значением q_0 , которое отвечает минимуму электронного термина $V_n(q)$ (U_{eff}):

$$\Psi(r, q) = \varphi_n(r, q_0) \Psi_{v_n}(q). \quad (1.3)$$

В случае двухатомной молекулы эффективную потенциальную энергию $U_{\text{eff}}(q)$ аппроксимируют такими потенциалами, как гармонический, Морзе [251], Леннарда — Джонса [252], Гульберта — Гиршфельдера [253] и др., которые позволяют исследовать волновые функции аналитическими методами. Эффективную потенциальную энергию можно найти методами Клейна — Данхема и Ридберга — Клейна — Рисса из спектроскопических данных. В этом случае расчет волновых функций и интенсивностей переходов производится численными методами (см. [277—279, 281]). Вопросам электронно-колебательных спектров посвящена громадная литература. Укажем только ряд монографий [254—260] и обзоров [250, 261, 262], содержащих подробную библиографию вопроса.

В случае многоатомных молекул обычно ограничиваются гармоническим приближением, дающим возможность находить колебательные волновые функции. Нахождение эффективной потенциальной энергии многоатомной молекулы представляет собой весьма трудную задачу, решенную лишь для отдельных молекул [256].

Процессы излучения и поглощения фотона молекулой могут сопровождаться изменением ее электронного состояния. В этом случае говорят о вибронных (электронно-колебательных) переходах.

Если электронное состояние молекулы не изменяется, то в этом случае говорят о чисто колебательном переходе. Эти переходы описывают эффекты комбинационного рассеяния, а также инфракрасные спектры излучения и поглощения [263—271].

Распределение интенсивностей колебательных полос в электронных спектрах двухатомных молекул описывается посредством принципа Франка — Кондона [273, 274]. Распространение принципа Франка — Кондона на многоатомные молекулы было сделано Герцбергом и Теллером [275]. Применимость к многоатомным молекулам принципа Франка — Кондона является следствием того, что для них, как и для двухатомных молекул, характерное время перестройки электронной конфигурации значительно меньше характерных времен относительного движения ядер. При этом наиболее вероятны переходы при малых скоростях ядер,

соответствующих их положениям, близким к точкам поворота классического движения [276].

Интенсивность излучения (поглощения) фотона определяется величиной матричного элемента дипольного момента M . Этот матричный элемент в адиабатическом приближении принимает вид

$$\langle v', n' | M | v, n \rangle = \langle v' | R_{n'n}^e(q) | v \rangle, \quad (1.4)$$

где $R_{n'n}^e(q)$ — матричный элемент, вычисленный с помощью электронных волновых функций $\varphi_n(r, q)$:

$$R_{n'n}^e(q) = \langle n' | M | n \rangle. \quad (1.5)$$

В случае разрешенного электронного перехода $R_{n'n}^e(q_0) \neq 0$ и слабо зависит от q_0 . При вычислении (1.4) можно использовать приближение Кондона, т. е. заменить q его равновесным значением $\langle v', n | M | v, n \rangle = R_{n'n}^e(q_0) \langle v' | v \rangle$. Матричный элемент $\langle v' | v \rangle$ — интеграл перекрытия — определяет зависимость момента перехода от колебательных квантовых чисел. Квадрат модуля $q_{v'v} = |\langle v' | v \rangle|^2$ называется фактором Франка — Кондона.

Обычно экспериментально наблюдаются только относительные интенсивности в спектрах излучения или поглощения при вибронном переходе в многоатомной молекуле. При этом измеряют интенсивность всей колебательной полосы, не разрешая вращательную структуру.

В приближении Кондона [274] интенсивности вибронных полос, пропорциональные квадрату дипольного момента, выражаются через фактор Франка — Кондона в спектре поглощения

$$\frac{I_{v_k v_i}^{\text{abs}}}{I_{00}^{\text{abs}}} = \frac{\Omega_{v_k v_i}}{\Omega_{00}} \left| \frac{\langle v'_k | v_i \rangle}{\langle 0 | 0 \rangle} \right|^2 \quad (1.6)$$

и в спектре излучения

$$\frac{I_{v_k v_i}^{\text{em}}}{I_{00}^{\text{em}}} = \left(\frac{\Omega_{v_k v_i}}{\Omega_{00}} \right)^4 \left| \frac{\langle v'_k | v_i \rangle}{\langle 0 | 0 \rangle} \right|^2, \quad (1.7)$$

где $I_{v_k v_i}$ — интенсивность вибронного перехода $\{v'_k\} - \{v_i\}$, v'_k и v_i — колебательные квантовые числа верхнего и нижнего электронных состояний, $\Omega_{v_k v_i}$ — частота перехода $\{v'_k\} - \{v_i\}$.

Для двухатомных молекул хорошо разработаны методы аналитического и численного расчета факторов Франка — Кондона. В обзорах [277—281] описаны методы расчета и составлены подробные таблицы молекул, для которых произведено вычисление факторов Франка — Кондона различными методами.

Количественные расчеты факторов Франка — Кондона в случае многоатомных молекул выполняются, как правило, в гармоническом приближении.

При анализе интенсивностей наблюдаемых спектров снискала широкую популярность модель, позволяющая просто вычислить интеграл перекрытия. В основе этой модели лежат два предположения: в основном электронном состоянии колебания описываются гармоническим потенциалом $U_{\text{осн}}(q)$; при переходе в возбужденное электронное состояние форма потенциала не изменяется, а происходит только сдвиг на d положения равновесия $U_{\text{возб}}(q) = U_{\text{осн}}(q + d)$. В этом случае многомерный интеграл перекрытия превращается в произведение интегралов перекрытия волновых функций, отвечающих одномерным осцилляторам с одинаковой частотой, но с различными положениями равновесия. В рамках этой модели пренебрегают, во-первых, эффектом изменения частоты моды вследствие электронного перехода, во-вторых, эффектом взаимодействия мод во время перехода, описанным Душинским [282]. Эффект Душинского приводит в гармоническом приближении к линейной зависимости координаты одной моды после перехода от координат всех мод до перехода. Модель применялась для интерпретации вибронных спектров: примесных центров [283—285], ароматических углеводородов [286], красителей, молекулярных кристаллов и др. В [250, 261] содержится обзор экспериментальных и теоретических работ, в которых успешно использовалась эта модель. Однако еще в работе Крейга [287] на примере молекулы бензола было показано, как можно использовать принцип Франка — Кондона для расчета геометрической структуры возбужденного состояния. В этой работе был вычислен одномерный интеграл перекрытия с учетом изменения частоты и сдвига положения равновесия. Сравнение экспериментальной интенсивности полос одной из прогрессий в спектре бензола с вычисленной позволило определить изменение длины C—C-связи в бензоле.

Принципиальное отличие проблемы вычисления факторов Франка — Кондона для многоатомной молекулы от случая двухатомной молекулы заключается в необходимости учета эффекта Душинского [282], состоящего в зависимости k -й нормальной координаты возбужденного состояния, вообще говоря, от всех нормальных координат основного состояния. В работе Куна и др. [288] был развит приближенный метод расчета фактора Франка — Кондона с учетом как частного эффекта, так и эффекта Душинского. Метод Куна [288] позволяет посредством итеративной процедуры оценить углы поворота осей нормальных координат одного электронного состояния относительно осей другого состояния (углы смешивания нормальных координат), считая их малыми. С помощью этого метода для нелинейной молекулы XY_2 оказалось возможным вычислить изменение длины X—Y-связи и угла между связями. По методу Куна и др. ряд конкретных расчетов был проведен в работах [289—293]. Точный, а не приближенный учет угла смешивания дан в работе [294], где в замкнутом виде вычислен интеграл перекрытия для волновых функций двумерного

гармонического осциллятора. В [294] также предложен метод анализа экспериментальных данных распределения интенсивностей, позволяющий определить геометрию нелинейной молекулы типа XY_2 в возбужденном электронном состоянии.

Шарп и Розенсток [295] с помощью производящих функций получили некоторые общие выражения для интегралов перекрытия между волновыми функциями N -мерного гармонического осциллятора и применили их к процессу вертикальной ионизации некоторых простых многоатомных молекул. Следует отметить, что выбранная в работе [295] параметризация требует для эффективного применения аппарата полного анализа данного колебательного спектра. Зависимость распределения интенсивностей от изменения длин связей обсуждается в работе [296], а также в обзоре [250], где даны ссылки на более ранние работы. Отметим также работу [297], в которой показано, что теоретически непоследовательным является применение теории Герцберга — Теллера с пренебрежением эффектом Душинского.

Работы [294, 298—301] посвящены изучению многомерных интегралов перекрытия с позиции динамической симметрии [8, 81]. Основная идея такого подхода состоит в том, чтобы описать спектр энергии системы как единое неприводимое представление некоторой динамической некомпактной группы, которое реализуется на всех состояниях системы. Так как в задаче о вибронных переходах одно и то же представление реализуется на начальных и конечных состояниях системы, то амплитуда перехода (интеграл перекрытия) между ними является матричным элементом представления динамической группы. При изложении материала в настоящей главе мы следуем работам [294, 298—302].

§ 2. Вибронные переходы многоатомной молекулы в гармоническом приближении

В приближении Борна — Оппенгеймера [245] колебания ядер в основном электронном состоянии молекулы описываются гамильтонианом

$$\mathcal{H}_{\text{in}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \hbar \omega_i \{a_i, a_i^\dagger\}, \quad (2.1)$$

где ω_i — частота, отвечающая массово-взвешенной нормальной координате q_i ; $\{a_i, a_i^\dagger\} = a_i a_i^\dagger + a_i^\dagger a_i$; N — число колебательных степеней свободы молекулы. Операторы уничтожения и рождения a_i и a_i^\dagger обычным образом выражаются через нормальную координату q_i и сопряженный ей импульс p_i :

$$\begin{aligned} a_i &= 2^{-1/2} \left[\left(\frac{\omega_i}{\hbar} \right)^{1/2} q_i + i (\hbar \omega_i)^{-1/2} p_i \right]; \\ a_i^\dagger &= 2^{-1/2} \left[\left(\frac{\omega_i}{\hbar} \right)^{1/2} q_i - i (\hbar \omega_i)^{-1/2} p_i \right]. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Коммутационные соотношения имеют следующий вид:

$$[a_i, a_j] = 0; \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0; \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}.$$

Волновые функции стационарных состояний гамильтониана (2.1) имеют вид

$$|v\rangle = \prod_{i=1}^N \left[N_i \exp\left(-\frac{\omega_i q_i^2}{2\hbar}\right) H_{v_i}\left(\left(\frac{\omega_i}{\hbar}\right)^{1/2} q_i\right) \right], \quad (2.3)$$

где $v = (v_1, v_2, \dots, v_N)$ — набор колебательных квантовых чисел; $N_i = [(\pi\hbar\omega_i)^{1/2} 2^{v_i} v_i!]^{-1/2}$; $H_v(x)$ — полином Эрмита.

В возбужденном электронном состоянии молекулы гамильтониан \mathcal{H}_t , описывающий колебания ядер в новых нормальных координатах $\{q_k\}$, имеет вид

$$\mathcal{H}_t = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \hbar \omega'_k \{b_k, b_k^\dagger\},$$

где ω'_k — частота, отвечающая нормальной координате q'_k , а операторы b_k, b_k^\dagger и волновые функции $|v'\rangle$ даются формулами (2.2) и (2.3) с заменами $q_i \rightarrow q'_i, p_i \rightarrow p'_i, \omega_i \rightarrow \omega'_i, v_i \rightarrow v'_i$.

В результате электронного перехода происходит деформация равновесной конфигурации ядер молекулы, что приводит к изменению равновесных длин связей и углов между ними. Это, в свою очередь, означает, что нормальные координаты до и после электронного перехода оказываются связанными соотношением Душинского [282]

$$q'_k = \sum_{i=1}^N S_{ki} q_i + d_k, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (2.4)$$

где $\|S_{ki}\|$ — ортогональная матрица, описывающая поворот в N -мерном пространстве нормальных координат; d_k — сдвиг в этом пространстве. Преобразование (2.4) индуцирует каноническое преобразование от операторов a_i, a_i^\dagger к операторам b_k, b_k^\dagger вида

$$b_k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\omega_i \omega'_k)^{-1/2} S_{ki} [(\omega'_k + \omega_i) a_i + (\omega'_k - \omega_i) a_i^\dagger] + \left(\frac{\omega'_k}{2\hbar}\right)^{1/2} d_k; \quad (2.5)$$

$$b_k^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\omega_i \omega'_k)^{-1/2} S_{ki} [(\omega'_k - \omega_i) a_i + (\omega'_k + \omega_i) a_i^\dagger] + \left(\frac{\omega'_k}{2\hbar}\right)^{1/2} d_k.$$

Детальное рассмотрение канонических преобразований операторов как бозе-, так и ферми-типа дано в работе [109].

Поскольку время электронного перехода мало по сравнению с характерным периодом колебаний ядер в молекуле, то изменение колебательного гамильтониана от \mathcal{H}_{in} к \mathcal{H}_t можно рассматривать

как внезапное возбуждение N -мерного осциллятора, в результате которого изменяется и частота нормальных колебаний, и геометрическая конфигурация молекулы. Преобразование (2.5) позволяет выразить гамильтониан \mathcal{H}_f через операторы a_i, a_i^\dagger в виде

$$\mathcal{H}_f = \sum_{i,j}^N [b_{ij}^{(1)} a_i a_j + b_{ij}^{(2)} a_i a_j^\dagger + b_{ij}^{(2)*} a_i^\dagger a_j + b_{ij}^{(1)*} a_i^\dagger a_j^\dagger] + \sum_{i=1}^N (C_i a_i + C_i^* a_i^\dagger) + C_0. \quad (2.6)$$

Это приводит к возможности рассматривать вибронные переходы молекул как задачу о внезапном возбуждении квадратичной системы. В гл. III была рассмотрена задача о возбуждении нестационарной квадратичной системы, гамильтониан которой имеет вид (2.6) с коэффициентами $b_{ij}^{(\lambda)}$, C_i , C_0 , являющимися произвольными функциями времени. Для этой задачи в гл. III была получена функция Грина и найдено выражение для амплитуды перехода между фоковскими состояниями через полином Эрмита от нескольких переменных.

Амплитуда перехода между стационарными состояниями начального \mathcal{H}_{in} и конечного \mathcal{H}_f гамильтонианов в случае внезапного возбуждения дается интегралом перекрытия между этими состояниями

$$T_{v'v} = \langle v', f | v, in \rangle. \quad (2.7)$$

§ 3. Динамическая симметрия

В качестве группы динамической симметрии стационарного гамильтониана \mathcal{H}_{in} рассмотрим, следуя [294, 300], группу $G = \text{Sp}(2N, R) \wedge H(N)$, являющуюся полупрямым произведением вещественной симплектической группы и группы Гейзенберга — Вейля $H(N)$.

Реализуем эту группу как подгруппу симплектической группы $\text{Sp}(2(N+1), R)$ большей размерности [202]. Симплектические матрицы размером $2N \times 2N$ удовлетворяют условию $g^{-1} = J^{-1} g J$. Матрица J_N размером $2N \times 2N$ имеет вид

$$J_N = \begin{vmatrix} 0 & -S_N \\ S_N & 0 \end{vmatrix}, \quad \text{где } S_N = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$$

— матрица размером $N \times N$.

Всякий элемент $g \in G$ может быть записан в виде $g = g_0 h$, где g_0 и h — симплектические матрицы размером $2(N+1) \times 2(N+1)$ блочного вида:

$$g_0 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & g'_0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}; \quad h = \begin{vmatrix} 1 & \tilde{h}' & z \\ 0 & E & J_N h' \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix},$$

причем g'_0 — симплектическая матрица размером $2N \times 2N$; E — единичная матрица; h' — $2N$ -мерный вектор; z — число. Матрицы вида h принадлежат подгруппе Гейзенберга — Вейля.

Проективные представления неоднородной симплектической группы $ISp(N, R)$ рассмотрены в работах [109, 110, 197, 198, 200].

Генераторы группы G могут быть построены из операторов рождения и уничтожения (2.2). Именно, генераторы h_μ , $\mu = 1, 2, \dots, 2N$, отвечающие подгруппе Гейзенберга — Вейля $H(N)$, имеют вид

$$h_i = a_i; \quad h_{N+i} = a_i^\dagger. \quad (3.1)$$

Генераторы $X_{\mu\nu}$, отвечающие подгруппе $Sp(2N, R)$, равны

$$\|X_{\mu\nu}\| = \begin{vmatrix} a_i a_j & 1/2 \{a_i, a_j^\dagger\} \\ 1/2 \{a_i^\dagger, a_j\} & a_i^\dagger a_j^\dagger \end{vmatrix}. \quad (3.2)$$

Генератору центра z группы G отвечает единичный оператор E .

С целью построения группы динамической симметрии для нестационарного квадратичного гамильтониана $\mathcal{H}(t)$, описывающего колебания ядер как до, так и после электронного перехода, будем следовать методу, предложенному в работах [74, 81]. В них показано, что с гамильтонианом $\mathcal{H}(t)$ вида (2.6) можно связать $2N$ линейных по координатам и импульсам интегралов движения

$$I_i^{(1)} = \sum_{j=1}^N (\lambda_{ij}^{(1)} p_j + \lambda_{ij}^{(2)} q_j) + \delta_i^{(1)}; \quad (3.3)$$

$$I_i^{(2)} = \sum_{j=1}^N (\lambda_{ij}^{(3)} p_j + \lambda_{ij}^{(4)} q_j) + \delta_i^{(2)},$$

где блочная вещественная матрица $\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda^{(1)} & \lambda^{(2)} \\ \lambda^{(3)} & \lambda^{(4)} \end{pmatrix}$ является симплектической. Явные выражения для $\lambda_{ij}^{(k)}(t)$ и $\delta_i^{(k)}(t)$ приведены в [76] (см. (4.3) гл. III).

Оператор эволюции U , который удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = \mathcal{H}U(t) \quad (U(0) = I),$$

связывает интегралы движения $I_i^{(1)}$ и $I_i^{(2)}$ с координатами q_i и импульсами p_i :

$$I_i^{(1)} = U(t)p_i U^{-1}(t); \quad I_i^{(2)} = U(t)q_i U^{-1}(t). \quad (3.4)$$

В силу (3.3), (3.4) интегралы движения

$$A_i = 2^{-1/2}(iI_i^{(1)} + I_i^{(2)}), \quad A_i^\dagger = 2^{-1/2}(-iI_i^{(1)} + I_i^{(2)})$$

Связаны с операторами a_i, a_j^\dagger соотношениями

$$A_i(t) = U(t) a_i U^{-1}(t) = \sum_{j=1}^N (u_{ij} a_j + v_{ij} a_j^\dagger) + w_i; \quad (3.5)$$

$$A_i^\dagger(t) = U(t) a_i^\dagger U^{-1}(t) = \sum_{j=1}^N (v_{ij}^* a_j + u_{ij}^* a_j^\dagger) + w_i^*,$$

где

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left[(\hbar\omega_j)^{1/2} (\lambda_{ij}^{(1)} - i\lambda_{ij}^{(3)}) + i \left(\frac{\hbar}{\omega_j} \right)^{1/2} (\lambda_{ij}^{(2)} - i\lambda_{ij}^{(4)}) \right];$$

$$v_{ij} = \frac{1}{2} \left[(\hbar\omega_j)^{1/2} (\Lambda_{ij}^{(1)} - i\Lambda_{ij}^{(3)}) - i \left(\frac{\hbar}{\omega_j} \right)^{1/2} (\Lambda_{ij}^{(2)} - i\Lambda_{ij}^{(4)}) \right]; \quad (3.6)$$

$$w_i = i 2^{1/2} (\delta_i^{(1)} - i\delta_i^{(2)}).$$

С помощью интегралов движения можно построить генераторы динамической группы $G = \text{Sp}(2NR) \wedge H(N)$ нестационарного гамильтониана по формулам (3.1), (3.2), заменяя в них a_i на A_i и a_i^\dagger на A_i^\dagger . В силу (3.5) новые генераторы будут связаны со старыми соотношениями

$$X_{\mu\nu}(t) = U(t) X_{\mu\nu} U^{-1}(t); \quad h_\mu(t) = U(t) h_\mu U^{-1}(t).$$

Очевидно, что нестационарный квадратичный гамильтониан, описывающий вибранный переход, линейно зависит от генераторов неприводимого представления алгебры Ли группы $\text{Sp}(N, n) \wedge H(N)$. Таким образом, для описания вибранного перехода в молекуле будем следовать общей схеме теоретико-группового подхода, изложенной в [205]. Из результатов § 2 гл. III следует, что оператор эволюции $U(t)$ является оператором, принадлежащим группе динамической симметрии G .

С учетом вышеизложенного ясно, что существует оператор Σ , принадлежащий динамической группе G и связывающий операторы a_i^\dagger, a_i и b_i^\dagger, b_i соотношениями вида

$$b_i = \Sigma^\dagger a_i \Sigma; \quad b_i^\dagger = \Sigma^\dagger a_i^\dagger \Sigma.$$

Отметим, что для случаев $N = 1, N = 2$ явное выражение для Σ в виде функции операторов a_i и a_i^\dagger приведено в [302, 294].

Оператор Σ связывает состояния начального \mathcal{H}_{in} и конечного \mathcal{H}_{f} гамильтонианов: $|v, \text{in}\rangle = \Sigma |v, \text{f}\rangle$. Интегралы перекрытия являются, следовательно, матричными элементами оператора группы динамической симметрии:

$$T_{v'v} = \langle v', \text{in} | \Sigma | v, \text{in}\rangle = \langle v', \text{f} | \Sigma | v, \text{f}\rangle. \quad (3.7)$$

Легко написать явное выражение для оператора Σ :

$$\Sigma = S_t S_\tau^\dagger S_x S_\tau. \quad (3.8)$$

Здесь оператор сдвига в пространстве нормальных координат имеет вид

$$S_i = \exp[(\omega_i/2\hbar)^{1/2} d_i (a_i^\dagger - a_i)].$$

Операторы S_τ и $S_{\tau'}$ растяжения координатных осей в $\omega_i^{1/2}$ и $\omega_i'^{1/2}$ раз соответственно равны

$$S_\tau = \exp [1/2 \tau_i (a_i^2 - a_i^{\dagger 2})]; \quad S_{\tau'} = \exp [1/2 \tau'_i (a_i^2 - a_i^{\dagger 2})],$$

где

$$\tau_i = 1/2 \ln \omega_i; \quad \tau'_i = 1/2 \ln \omega'_i. \quad (3.9)$$

Наконец, S_χ — оператор поворота, отвечающий матрице $\| S \|$.

В случае, когда ортогональная матрица $\| S_{ki} \|$, входящая в (2.4), (2.5), достаточно близка к единичной и допускает экспоненциальное представление вида $\| S_{ki} \| = \exp \| -\chi_{ki} \|$, где $\chi_{ki} = -\chi_{ki}$ — антисимметричная матрица, оператор S_χ равен

$$S_\chi = \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \chi_{ij} (a_i a_j^\dagger - a_i^\dagger a_j) \right].$$

§ 4. Интегралы перекрытия и рекуррентные соотношения

Для нахождения интегралов перекрытия $\langle v' | v \rangle$ между колебательными волновыми функциями типа (2.3) начального и конечного электронных состояний воспользуемся, как и в работах [294, 300], представлением когерентных состояний [94]. Когерентные состояния $| \alpha \rangle$, реализующие, как и состояния $| v \rangle$, базис пространства неприводимого представления динамической группы, определяются как собственные состояния операторов уничтожения: $a_i | \alpha \rangle = \alpha_i | \alpha \rangle$. Здесь α_i ($i = 1, 2, \dots, N$) — набор произвольных комплексных чисел. Явное выражение для когерентного состояния N -мерного гармонического осциллятора имеет вид

$$| \alpha \rangle = (\pi \hbar)^{-N/4} \left(\prod_{j=1}^N \omega_j^{1/4} \right) \times \\ \times \exp \left\{ \sum_{i=1}^N \left[-\frac{1}{2} \frac{\omega_i}{\hbar} q_i^2 + \left(\frac{2\omega_i}{\hbar} \right)^{1/2} \alpha_i q_i - \frac{1}{2} \alpha_i^2 - \frac{1}{2} |\alpha_i|^2 \right] \right\}.$$

Интеграл перекрытия $\langle v' | \alpha \rangle$ между когерентными состояниями начального и конечного осцилляторов, который служит производящей функцией для искомых интегралов перекрытия $\langle v' | v \rangle$ (см. § 4 гл. III), выражается, согласно [300], в виде квадратичной

экспоненты по α и γ^* :

$$\langle \gamma | \alpha \rangle = \langle 0 | 0 \rangle \exp \left[-\frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\gamma|^2) \right] \times \\ \times \exp \left[-\frac{1}{2} (\alpha \gamma^*) \begin{vmatrix} 1-2Q & -2R \\ -2\tilde{R} & 1-2P \end{vmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \gamma^* \end{pmatrix} + 2^{1/2} (\alpha \gamma^*) \begin{vmatrix} -R & 0 \\ 0 & 1-P \end{vmatrix} \begin{pmatrix} \delta \\ \delta \end{pmatrix} \right] \quad (4.1)$$

Здесь симметричные положительно определенные матрицы Q и P , а также матрица R размерами $N \times N$ определены следующим образом:

$$Q = (1 + \tilde{J}J)^{-1}; \quad P = JQ\tilde{J}; \quad R = Q\tilde{J}, \quad (4.2)$$

где $J = \lambda_\omega S \lambda_\omega^{-1}$, $\lambda_\omega \equiv \text{diag}(\omega_1^{1/2}, \omega_2^{1/2}, \dots, \omega_N^{1/2})$, а матрица S введена в (2.4). Кроме того, $\delta = \lambda_\omega \tilde{d} \hbar^{-1/2}$, где \tilde{d} — также из (2.4). Матричный элемент $\langle 0 | 0 \rangle$ равен

$$\langle 0 | 0 \rangle = 2^{N/2} \left[\prod_{j=1}^N \left(\frac{\omega'_j}{\omega_j} \right)^{1/2} \right] (\det Q)^{1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \delta (1 - P) \delta \right].$$

Матрицы P , Q и R для $N = 2$ приведены в явном виде в [294].

Формула (4.1) для $\langle \gamma | \alpha \rangle$ совпадает в случае $N = 2$ с полученной ранее в работе [294]. Таким образом, структура производящей функции для интегралов перекрытия $\langle v' | v \rangle$ не зависит от числа колебательных степеней свободы. Тем самым анализ рассматриваемой проблемы в терминах когерентных состояний позволяет выявить ряд общих закономерностей, присущих интегралам перекрытия $\langle v' | v \rangle$. Отметим, что производящая функция для N -мерных интегралов перекрытия $\langle v' | v \rangle$ рассматривалась в работе [295].

Разлагая (4.1) в степенной ряд по α и γ^* , получим наиболее общее выражение для интеграла перекрытия $\langle v' | v \rangle$ через полином Эрмита от $2N$ переменных [300]:

$$\langle v' | v \rangle = \langle 0 | 0 \rangle \left[\prod_{j=1}^N (v_j! v'_j!)^{-1/2} \right] H_{v, v'}(\sigma, \tau'), \quad (4.3)$$

причем N -мерные аргументы σ и τ' записываются в виде

$$\begin{pmatrix} \sigma \\ \tau' \end{pmatrix} = 2^{1/2} \begin{vmatrix} 1-2Q & -2R \\ -2R & 1-2P \end{vmatrix}^{-1} \begin{vmatrix} -R & 0 \\ 0 & 1-P \end{vmatrix} \begin{pmatrix} \delta \\ \delta \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Соотношения (4.3) и (4.4) для $N = 2$ переходят в соответствующие формулы, полученные в [294]. Свойства многомерных полиномов Эрмита обсуждаются в книгах [223, 88].

Рекуррентные соотношения для интегралов перекрытия (4.3) немедленно следуют из производящей функции (4.1). Так, дифференцирование ее по α_i приводит к следующим N рекуррент-

НЫМ СООТНОШЕНИЯМ ($i = 1, 2, \dots, N$):

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v}' | v_1, \dots, v_i + 1, \dots, v_N \rangle = \\ = \sum_{j=1}^N (2Q - 1)_{ij} \left(\frac{v_j}{v_i + 1} \right)^{1/2} \langle \mathbf{v}' | v_1, \dots, v_j - 1, \dots, v_N \rangle + \\ + 2 \sum_{k=1}^N R_{ik} \left(\frac{v'_k}{v_i + 1} \right)^{1/2} \langle v'_1, \dots, v'_k - 1, \dots, v'_N | v_1, \dots, v_i, \dots, v_N \rangle - \\ - \left(\frac{2}{v_i + 1} \right)^{1/2} (R\delta)_i \langle \mathbf{v}' | v_1, \dots, v_i, \dots, v_N \rangle. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Аналогично, дифференцирование по \mathbf{v}'_k дает ($k = 1, 2, \dots, N$)

$$\begin{aligned} \langle v'_1, \dots, v'_k + 1, \dots, v'_N | \mathbf{v} \rangle = \\ = 2 \sum_{i=1}^N R_{ki} \left(\frac{v_i}{v'_k + 1} \right)^{1/2} \langle v'_1, \dots, v'_k, \dots, v'_N | v_1, \dots, v_i - 1, \dots, v_N \rangle + \\ + \sum_{l=1}^N (2P - 1)_{kl} \left(\frac{v'_l}{v'_k + 1} \right)^{1/2} \langle v'_1, \dots, v'_l - 1, \dots, v'_N | \mathbf{v} \rangle + \\ + \left(\frac{2}{v'_k + 1} \right)^{1/2} [(1 - P)\delta]_k \langle v'_1, \dots, v'_k, \dots, v'_N | \mathbf{v} \rangle. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Если некоторые колебательные моды не возбуждаются в процессе электронного перехода, то соответствующий интеграл перекрытия сводится к полиному Эрмита от меньшего числа переменных. При этом можно указать общее правило редукции, позволяющее сразу написать интеграл перекрытия в этом случае. Действительно, для получения интеграла перекрытия между колебательными волновыми функциями начального состояния, в котором не возбуждены i -я, j -я, \dots колебательные моды, и конечного состояния, в котором не возбуждены k -я, l -я, \dots колебательные моды, нужно вычеркнуть в блочных матрицах, входящих в (4.4), i -ю, j -ю, \dots , $(N + k)$ -ю, $(N + l)$ -ю, \dots строки и столбцы. Оставшиеся матрицы меньшей размерности будут задавать аргументы соответствующего полинома Эрмита. В частности, получаем

$$\langle \mathbf{v}' | 0 \rangle = \langle 0 | 0 \rangle \left[\prod_{k=1}^N (v'_k!)^{-1/2} \right] H_{\mathbf{v}'}(\boldsymbol{\tau}'); \quad \boldsymbol{\tau}' = 2^{1/2} (1 - 2P)^{-1} (1 - P) \boldsymbol{\delta}. \quad (4.7)$$

В случае, когда возбуждены только две моды, интегралы перекрытия записываются в виде *)

$$\langle v'_k, v'_l | 0 \rangle = \langle 0 | 0 \rangle (v'_k! v'_l!)^{-1/2} H_{v'_k, v'_l}(\boldsymbol{\tau}'_k, \boldsymbol{\tau}'_l), \quad (4.8)$$

*) Здесь и в дальнейшем символ $|v_i, v_j\rangle$ означает состояние, в котором возбуждены только i -я и j -я колебательные моды с частотами ω_i, ω_j , а оставшиеся $N - 2$ колебательных квантовых числа равны 0. Аналогично, символ $|v_k\rangle$ означает возбуждение только одной моды с частотой ω_k в данном состоянии.

$$\begin{pmatrix} \tau'_k \\ \tau'_l \end{pmatrix} = 2^{1/2} \begin{vmatrix} 1 - 2P_{kk} & -2P_{kl} \\ -2P_{kl} & 1 - 2P_{ll} \end{vmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} [(1-P)\delta]_k \\ [(1-P)\delta]_l \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Явные выражения для матричных элементов $\langle 0 | v_i, v_j \rangle$ и $\langle v'_k | v_i \rangle$ приведены в [300] и [294].

Если величины эффективных сдвигов $(R\delta)_i$ и $[(1-P)\delta]_k$ обращаются в нуль, то интегралы перекрытия (4.7) — (4.9) сводятся к сферическим функциям (см. формулы (2.20) — (2.22) работы [294]).

Далее, в случае одного отличного от нуля квантового числа получим

$$\langle v'_k | 0 \rangle = \langle 0 | 0 \rangle (v'_k!)^{-1/2} \left(\frac{1 - 2P_{kk}}{2} \right)^{v'_k/2} H_{v'_k}(\tau'_k), \quad (4.10)$$

$$\tau'_k = (1 - 2P_{kk})^{-1/2} [(1 - P)\delta]_k, \quad (4.11)$$

где $H_p(x)$ — классические полиномы Эрмита. Подчеркнем, что, несмотря на возбуждение только одной колебательной моды, формулы (4.10), (4.11) не сводятся к соответствующим формулам для одномерного осциллятора с частотой ω_i или ω'_k . Элементы матриц P, Q, R , входящие в (4.3), (4.10), (4.11), зависят от всех нормальных частот обоих электронных состояний и могут быть найдены по экспериментальным данным.

Формулы (4.10), (4.11) эквивалентны выражениям, полученным ранее в работах [295, 303]. При $N = 2$ выражения (4.7) — (4.11) переходят в соответствующие формулы, приведенные в работе [294].

Рекуррентные соотношения для интегралов перекрытия с некоторыми нулевыми квантовыми числами являются следствием общих соотношений (4.5), (4.6). Приведем наиболее важные из них [300]:

$$\begin{aligned} \langle v'_k + 1, v'_l | 0 \rangle &= (2P_{kk} - 1) \left(\frac{v'_k}{v'_k + 1} \right)^{1/2} \langle v'_k - 1, v'_l | 0 \rangle + \\ &+ 2P_{kl} \left(\frac{v'_l}{v'_k + 1} \right)^{1/2} \langle v'_k, v'_l - 1 | 0 \rangle + \\ &+ \left(\frac{2}{v'_k + 1} \right)^{1/2} [(1 - P)\delta]_k \langle v'_k, v'_l | 0 \rangle; \quad (4.12a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle 0 | v_i + 1, v_j \rangle &= (2Q_{ii} - 1) \left(\frac{v_i}{v_i + 1} \right)^{1/2} \langle 0 | v_i - 1, v_j \rangle + \\ &+ 2Q_{ij} \left(\frac{v_j}{v_i + 1} \right)^{1/2} \langle 0 | v_i, v_j - 1 \rangle - \left(\frac{2}{v_i + 1} \right)^{1/2} (R\delta)_i \langle 0 | v_i, v_j \rangle. \quad (4.13a) \end{aligned}$$

Приведем еще два типа рекуррентных соотношений, которые не являются независимыми от (4.12а), (4.13а) соответственно, но оказываются полезными при проведении конкретных расчетов [300]:

$$\begin{aligned} \langle v'_k + 1, v'_l | 0 \rangle = & \\ = \left(\frac{2}{v'_k + 1} \right)^{1/2} & \left\{ [(1 - P) \delta]_k - \frac{2P_{kl}}{2P_{ll} - 1} [(1 - P) \delta]_l \right\} \langle v'_k, v'_l | 0 \rangle + \\ + \frac{(2P_{kk} - 1)(2P_{ll} - 1) - 4P_{kl}^2}{2P_{ll} - 1} & \left(\frac{v'_k}{v'_k + 1} \right)^{1/2} \langle v'_k - 1, v'_l | 0 \rangle + \\ + \frac{2P_{kl}}{2P_{ll} - 1} & \left(\frac{v'_l + 1}{v'_k + 1} \right) \langle v'_k, v'_l + 1 | 0 \rangle; \quad (4.12б) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle 0 | v_i + 1, v_j \rangle = - \left(\frac{2}{v_i + 1} \right)^{1/2} & \left[(R\delta)_i - \frac{2Q_{ij}}{2Q_{jj} - 1} (R\delta)_j \right] \langle 0 | v_i, v_j \rangle + \\ + \frac{(2Q_{ii} - 1)(2Q_{jj} - 1) - 4Q_{ij}^2}{2Q_{jj} - 1} & \left(\frac{v_i}{v_i + 1} \right)^{1/2} \langle 0 | v_i - 1, v_j \rangle + \\ + \frac{2Q_{ij}}{2Q_{jj} - 1} & \left(\frac{v_j + 1}{v_i + 1} \right)^{1/2} \langle 0 | v_i, v_j + 1 \rangle. \quad (4.13б) \end{aligned}$$

Что касается рекуррентных соотношений для интегралов перекрытия вида $\langle v'_k | v_i \rangle$, то с учетом новой области изменения индексов ($k = 1, 2, \dots, N$) они полностью совпадают с такими же рекуррентными соотношениями, полученными в работе [294] (см. формулы (2.14а) — (2.14д)).

Формула (4.3) для интеграла перекрытия получена без учета принадлежности молекулы определенной группе симметрии. Существенное упрощение этого выражения достигается в случае разрешенного электронного перехода, сохраняющего исходную симметрию молекулы. При этом, согласно лемме Шура, общий интеграл перекрытия (4.3) факторизуется в произведение интегралов перекрытия, каждый из которых отвечает типу колебаний, преобразующемуся по неприводимому представлению точечной группы симметрии. Так, интеграл перекрытия для полносимметричных колебаний *A*-типа будет по-прежнему выражаться формулой (4.3) с сохранением всех вышеприведенных рекуррентных соотношений. Рекуррентные соотношения для интегралов перекрытия для неполносимметричных колебаний *B*-типа следуют из формул (4.5), (4.6) при условии $\delta = 0$. Отметим, что явные выражения для интегралов перекрытия *B*-типа в терминах *D*-функции получены для $N = 1$ и $N = 2$ в работе [299].

Отметим, что общее выражение (4.3) для интеграла перекрытия будет справедливым и в том случае, если переход изменяет симметрию молекулы.

§ 5. Итеративный метод расчета интегралов перекрытия

В случае, когда углы смешивания малы, $\chi_{kt} \ll 1$, интеграл перекрытия $\langle v' | v \rangle$ можно разложить в ряд по χ_{ki} , коэффициенты которого выражаются через произведение интегралов перекрытия одномерных осцилляторов. Подставляя в (3.7) выражение оператора $\hat{\Sigma}$ из (3.8) и разлагая оператор S_χ в степенной ряд по параметрам χ_{ki} , находим [300]

$$T_{v'v} = \sum_{n=0}^{\infty} T_{v'v}^{(n)} \frac{1}{n!}, \quad (5.1)$$

где

$$T_{v'v}^{(n)} = \langle v', \text{in} | S_t S_\tau^\dagger S_\tau M^n | v, \text{in} \rangle,$$

$$M = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \chi_{ij} [\text{ch}(\tau_i - \tau_j) (a_i a_j^\dagger - a_i^\dagger a_j) + \text{sh}(\tau_i - \tau_j) (a_i a_j - a_i^\dagger a_j^\dagger)], \quad (5.2)$$

величина τ_i введена в (3.9).

Если параметры смешивания χ_{ij} равны нулю, интеграл перекрытия $\langle v' | v \rangle$ факторизуется в произведение одномерных интегралов перекрытия:

$$\begin{aligned} T_{v'v}^{(0)} &= \langle v', \text{in} | \exp \left[\left(\frac{\omega_j'}{2\hbar} \right)^{1/2} d_j (a_j^\dagger - a_j) \right] \exp [\mu_j (a_j^2 - a_j^{\dagger 2})] | v, \text{in} \rangle = \\ &= \prod_{j=1}^N \langle v'_j, \text{in} | S_{t_j} S_{\mu_j} | v_j, \text{in} \rangle, \end{aligned} \quad (5.3)$$

где

$$\begin{aligned} S_{t_j} &= \exp [(\omega_j'/2\hbar)^{1/2} d_j (a_j^\dagger - a_j)]; \quad S_{\mu_j} = \exp [\mu_j (a_j^2 - a_j^{\dagger 2})]; \\ \mu_j &= 1/4 \ln (\omega_j/\omega_j'). \end{aligned}$$

Как показано в [302], интеграл перекрытия $\langle v'_j, \text{in} | S_{t_j} S_{\mu_j} | v_j, \text{in} \rangle$ совпадает с интегралом перекрытия одномерного осциллятора [304]:

$$\langle v'_j, \text{in} | S_{t_j} S_{\mu_j} | v_j, \text{in} \rangle = \langle v'_j, \text{f} | v_j, \text{in} \rangle = \langle 0 | 0 \rangle_j (v_j! v_j')^{-1/2} H_{v_j, v_j'}(x_j, x_j'), \quad (5.4)$$

$$\langle 0 | 0 \rangle_j = \left(\frac{2 \sqrt{\omega_j \omega_j'}}{\omega_j + \omega_j'} \right)^{1/2} \exp \left(- \frac{1}{2\hbar} \frac{\omega_j \omega_j'}{\omega_j + \omega_j'} d_j^2 \right),$$

где $H_{v_j, v_j'}(x_j, x_j')$ — полином Эрмита от двух переменных [88],

а аргументы имеют вид *)

$$x_j = \frac{\omega_j'}{\omega_j + \omega_j'} \left(\frac{2\omega_j}{\hbar} \right)^{1/2} d_j; \quad x_j' = - \frac{\omega_j}{\omega_j + \omega_j'} \left(\frac{2\omega_j'}{\hbar} \right)^{1/2} d_j.$$

Учитывая затем результат действия операторов a_j, a_j^\dagger на состояние $|v_j\rangle$, можно вычислить поправку $T_{v'v}^{(n)}$. Приведем явное выражение для первого приближения:

$$\begin{aligned} T_{v'v}^{(1)} = & \sum_{\substack{i,j \\ i < j}}^N \chi_{ij} \langle v_1' | v_1 \rangle \dots \{ \text{ch}(\tau_i - \tau_j) [v_i^{1/2}(v_j + 1)^{1/2} \langle v_i' | v_i - 1 \rangle \times \\ & \times \langle v_j' | v_j + 1 \rangle - (v_i + 1)^{1/2} v_j^{1/2} \langle v_i' | v_i + 1 \rangle \langle v_j' | v_j - 1 \rangle] + \\ & + \text{sh}(\tau_i - \tau_j) [(v_i v_j)^{1/2} \langle v_i' | v_i - 1 \rangle \langle v_j' | v_j - 1 \rangle - (v_i + 1)^{1/2} (v_j + 1)^{1/2} \times \\ & \times \langle v_i' | v_i + 1 \rangle \langle v_j' | v_j + 1 \rangle] \dots \langle v_N' | v_N \rangle. \quad (5.5) \end{aligned}$$

Разложение (5.1) полезно в том случае, когда параметры сдвигов, входящие в S_i , велики по сравнению с параметрами смешивания, входящими в S_χ . Тогда с помощью (5.1) и явных выражений для величин $T_{v'v}^{(0)}$ и $T_{v'v}^{(1)}$ можно обобщить на многомерный случай итеративный метод, предложенный в работе Куна и др. [288] для нелинейных молекул типа XY_2 .

Действительно, в нулевом приближении полагаем $T_{v'v} = T_{v'v}^{(0)}$ и вычисляем $T_{v'v}^{(0)}$, используя (5.3) и (5.4). Для вычисления $H_{v,v'}(x, x')$ обычно используют рекуррентные соотношения Маннебака [304, 302]. Параметр сдвига d_j , входящий в $H_{v_j, v_j'}$, находят (см. § 6) по экспериментальным значениям относительных интенсивностей переходов **) из начального бесколебательного электронного состояния молекулы в конечное электронное состояние с возбуждением только одной колебательной моды, т. е. переходов вида $v_j' - 0$. Переходы типа $0 - v_i$ с поглощением колебательных квантов в начальном состоянии также пригодны для нахождения d . Поправки к нулевому приближению вычисляют, используя формулу (5.5). Величины параметров смешивания χ_{ij} могут быть найдены, например, из экспериментальных значений относительных интенсивностей переходов $1_i 1_j - 0$, $0 - 1_i 1_j$, $1_j - 1_i$.

*) Отметим, что формулы (5.3), (5.4) могут быть получены из результатов работ [42а, 185]. Для этого возбуждение нестационарного осциллятора следует рассматривать как внезапное и положить в формуле (3) работы [42а]

$$\xi_j = \frac{\omega_j + \omega_j'}{2(\omega_j \omega_j')^{1/2}}; \quad \eta_j = \frac{\omega_j - \omega_j'}{2(\omega_j \omega_j')^{1/2}}.$$

**) Обозначения типов переходов соответствуют обозначениям интегралов перекрытия (см. сноску на стр. 199).

Возникающая при этом система линейных уравнений слишком громоздка для явного выписывания.

Вопрос о выборе знаков при нахождении интегралов перекрытия из данных по интенсивностям решается путем дальнейшего сравнения вычисленных интенсивностей с их экспериментальными значениями.

§ 6. Метод парциального анализа вибронного перехода

В этом параграфе мы излагаем, следуя [300], метод, который позволяет найти элементы матриц P , Q , R и вектор δ , входящие в (4.1), и восстановить параметры S_{ki} , d_i преобразования Душинского (2.4) на основе анализа некоторых экспериментально найденных величин относительных интенсивностей $q(v'; v) \equiv \equiv |\langle v' | v \rangle / \langle 0 | 0 \rangle|^2$, т. е. факторов Франка—Кондона. Тем самым полностью решается задача о распределении интенсивностей полос, а также находится геометрическая конфигурация молекулы в возбужденном электронном состоянии.

В отличие от итеративного метода, излагаемый ниже метод парциального анализа не предполагает малости параметров смешивания нормальных координат и учитывает эффект изменения частот.

Первым этапом применения данного метода является рассмотрение переходов $v_k' - 0$ из начального бесколебательного состояния в конечное, в котором возбуждена только одна колебательная мода с частотой ω_k . По относительным интенсивностям $q(1_k; 0)$ и $q(2_k; 0)$ переходов $1_k - 0$, $2_k - 0$ находим параметры u_k' и Δ_k' :

$$u_k' = \frac{q(1_k; 0)}{q(1_k; 0) \pm 2^{1/2} q(2_k; 0)}; \quad \Delta_k' = \frac{q(1_k; 0)}{2u_k'}, \quad (6.1)$$

после чего интенсивности оставшихся переходов данной прогрессии выражаются либо формулой (см. (4.10))

$$q(v_k'; 0) = (\Delta_k')^{v_k'} (v_k!) H_{v_k}^2(x_k'), \quad (6.2)$$

где $x_k' = (1/2 u_k')^{1/2}$, либо с использованием рекуррентного соотношения (4.12а) с $v_i' = 0$. Величины P_{kk} и $[(1 - P)\delta]_k$, входящие в рекуррентные соотношения, также находятся по относительным интенсивностям $q(1_k; 0)$ и $q(2_k; 0)$. Действительно, из (4.10) находим

$$[(1 - P)\delta]_k^2 = 1/2 q(1_k; 0) \quad (6.3)$$

и

$$P_{kk} = 1/2 [1 \pm 2^{1/2} q^{1/2}(2_k; 0) - q(1_k; 0)]. \quad (6.4)$$

Выбор нужного знака в (6.1) и (6.4) производится из сопоставления вычисленных интенсивностей $q(v_k'; 0)$, $v_k' > 2$, с измеренными. Отметим также, что из условия неотрицательности диагональных

элементов матрицы P часто бывает возможным фиксировать знак в (6.4).

При проведении конкретных расчетов более удобно вместо формулы (6.2) пользоваться эквивалентными выражениями в терминах полиномов Лагерра [88]:

$$q(2n; 0) = (\Delta'_k)^{2n} [(2n)!]^{-1} (2^{2n}n!)^2 \left[L_n^{-1/2} \left(\frac{u'_k}{2} \right) \right]^2; \quad (6.2a)$$

$$q(2n+1; 0) = q(1_k; 0) (\Delta'_k)^{2n} [(2n+1)!]^{-1} (2^{2n}n!)^2 \left[L_n^{-1/2} \left(\frac{u'_k}{2} \right) \right]^2.$$

Формула типа (4.10) была использована ранее в работе [295] при рассмотрении вертикальной ионизации из основного состояния молекулы, а также в работе [303] в применении к анализу спектров сопряженных молекул.

Формула (6.2) позволяет обобщить на рассматриваемый случай формулу Герцберга — Теллера для одномодовой парциальной интенсивности $0-0$ -перехода:

$$\frac{q(0; 0)}{\sum_{v'_k=0}^{\infty} q(v'_k; 0)} = (1 - 4\Delta'_k)^{1/2} \exp \left(- \frac{2u'_k \Delta'_k}{1 + 2\Delta'_k} \right) = 2 [P_{kk} (1 - P_{kk})]^{1/2} \exp \left\{ - \frac{[(1 - P)\delta]_k^2}{1 - P_{kk}} \right\}. \quad (6.5)$$

Правило сумм типа (6.5) оказалось полезным при анализе экспериментальных интенсивностей вибронных переходов в нелинейной молекуле типа XY_2 (см. [294]). Оно может служить критерием применимости гармонического приближения.

Следующим этапом применения излагаемого метода является анализ переходов вида $v_k v_l - 0$ с возбуждением двух колебательных мод в конечном электронном состоянии. В этом случае по измеренным относительным интенсивностям $q(1_k; 0)$, $q(1_l; 0)$ находятся, в соответствии с формулой (6.3), эффективные сдвиги $[(1 - P)\delta]_k$ и $[(1 - P)\delta]_l$. Затем с учетом экспериментально найденной величины интенсивности перехода $1_k 1_l - 0$ вычисляются недиагональные элементы матрицы P :

$$P_{kl} = \pm 1/2 [q^{1/2}(1_k 1_l; 0) - q^{1/2}(1_k; 0)q^{1/2}(1_l; 0)]. \quad (6.6)$$

Недиагональные элементы матрицы P служат мерой нефакторизуемости интегралов перекрытия $\langle v'_k, v'_l | 0 \rangle$ в произведение двух интегралов перекрытия типа (4.10).

С помощью производящей функции (4.1) несложно получить аналог формулы Герцберга — Теллера для двухмодовой парциальной

ной интенсивности $0 - 0$ -перехода:

$$\frac{q(0; 0)}{\sum_{v_k, v_l=0}^{\infty} q(v_k, v_l; 0)} = 4 [(1 - P_{kk})(1 - P_{ll}) - P_{kl}^2]^{1/2} (P_{kk}P_{ll} - P_{kl}^2)^{1/2} \times \\ \times \exp \left\{ - [(1 - P_{ll})(1 - P)\delta]_k^2 + 2P_{kl}[(1 - P)\delta]_k[(1 - P)\delta]_l + \right. \\ \left. + (1 - P_{kk})[(1 - P)\delta]_l^2 [(1 - P_{kk})(1 - P_{ll}) - P_{kl}^2]^{-1} \right\}. \quad (6.7)$$

Таким образом, для полного нахождения элементов матрицы необходимо измерить относительные интенсивности $2N + 1/2N(N - 1)$ вибронных переходов вида $1_k - 0$, $2_k - 0$, $1_k 1_l - 0$, $k, l = 1, 2, \dots, N$, причем диагональные элементы находятся по формуле (6.4), а недиагональные — по формуле (6.6). Вектор δ находится затем из (6.3):

$$\delta_k = 2^{-1/2} \sum_{l=1}^N (1 - P)_{kl}^{-1} q^{1/2}(1_l; 0). \quad (6.8)$$

Следует отметить, что описанная выше процедура нахождения величин P_{kl} и δ_k неоднозначна. Это связано с произволом в выборе знака интеграла перекрытия, полученного из интенсивности рассматриваемого перехода (см. также обсуждение этой проблемы в работе [288]).

Для нахождения по матрице P матрицы S (2.4) необходимо решить уравнение (см. (4.2))

$$E + \lambda_{\omega}^{-1} S \lambda_{\omega}^2 \tilde{S} \lambda_{\omega}^{-1} = P^{-1}.$$

Это эквивалентно решению задачи о нахождении ортогональной матрицы S , диагонализующей матрицу $W' = \lambda_{\omega} \cdot (P^{-1} - E) \lambda_{\omega}$, т. е.

$$\tilde{S} W' S = \lambda_{\omega}^2. \quad (6.9)$$

Вектор d находится по известному из (6.8) вектору δ :

$$d = \lambda_{\omega}^{-1} \delta \hbar^{1/2}. \quad (6.10)$$

Тем самым по экспериментальным значениям относительных интенсивностей некоторых вибронных полос полностью восстановлено преобразование Душинского (2.4).

Вышеприведенный анализ может быть эквивалентным образом сформулирован в терминах матриц Q и R , если в качестве экспериментально задаваемых интенсивностей принять интенсивности переходов вида $0 - 1_i$, $0 - 2_i$, $0 - 1_i 1_j$ из начального электронного состояния, в котором возбуждены одна или две моды, в конечное бесколебательное электронное состояние. При этом формулы (6.1), (6.2), (6.2а), (6.4) сохраняют свой вид с интенсивностями $q(0; v_i)$, а формула (6.3) запишется в виде $(R\delta)_i^2 = = 2^{-1} q(0; 1_i)$. Аналог формулы (6.5) в терминах Q_{ii} , u_i и Δ_i будет

ИМЕТЬ ВИД

$$\frac{q(0;0)}{\sum_{v_i=0}^{\infty} q(0;v_i)} = (1 - 4\Delta_i^2)^{1/2} \exp\left(-\frac{2u_i\Delta_i}{1-2\Delta_i}\right) = 2[Q_{ii}(1-Q_{ii})]^{1/2} \exp\left[-\frac{(R\delta)_i^2}{1-Q_{ii}}\right].$$

Элементы Q_{kl} вычисляются по формуле (6.6), где следует сделать замены $P_{kl} \rightarrow Q_{kl}$; $[(1-P)\delta]_k \rightarrow (R\delta)_k$; $q(1_k, 1_l; 0) \rightarrow q(0; 1_k, 1_l)$, $q(1; 0) \rightarrow q(0; 1)$. С помощью таких же замен получается аналог формулы (6.7). Тем самым будет полностью определена матрица Q . Можно показать в общем виде, что замены $\omega_j \leftrightarrow \omega'_j$, $S \leftrightarrow \bar{S}$ переводят выражения с матрицей P в соответствующие выражения для матрицы Q . Так, матрица S преобразования (2.4) находится из условия диагонализации $SW\bar{S} = \lambda_\omega^2$ квадратичной формы $W = \lambda_\omega(Q^{-1} - E)\lambda_\omega$. С нахождением элементов матрицы S по формуле (4.2) получают матрицу R , после чего вектор δ находят из соотношения

$$\delta_i = 2^{-1/2} \sum_{j=1}^N (R^{-1})_{ij} q^{1/2}(0; 1_j). \quad (6.11)$$

(Знак минус в (6.11) опущен ввиду указанной выше неопределенности в выборе знаков интегралов перекрытия.) Вектор \bar{d} из преобразования (2.4) вычисляется затем по (6.10).

Обратим внимание на ряд преимуществ оперирования с матрицей R при анализе данного спектра. Если найдены экспериментально интенсивности переходов вида $1_k - 1_l$, когда в начальном и конечном электронных состояниях возбуждено по одному колебательному кванту, то $\|R\|$ находится из соотношения

$$R_{ik} = \pm^{1/2} [q^{1/2}(1_k; 1_i) - q^{1/2}(1_k; 0)q^{1/2}(0; 1_i)]. \quad (6.12)$$

С другой стороны, нетрудно показать, что

$$(R^{-1})_{ik} = \frac{\omega_i + \omega'_k}{(\omega_i \omega'_k)^{1/2}} S_{ik}. \quad (6.13)$$

Таким образом, знание матрицы R позволяет непосредственно оценить величину смешивания нормальных координат в результате электронного перехода (см. (2.4)).

Следует отметить, что матрицы P , Q , R не являются независимыми одна от другой и знание одной из этих матриц ведет к получению остальных при помощи простых соотношений (4.2).

Хотя проблема обсуждается на примере спектра поглощения, полученные результаты применимы в равной мере к анализу спектров испускания. Более того, можно непосредственно вычислить распределение интенсивностей в спектре испускания, исходя из анализируемого спектра поглощения, и наоборот.

§ 7. Геометрическая конфигурация возбужденного состояния

Согласно принципу Франка — Кондона относительные интенсивности вибронных полос зависят от изменения геометрии молекулы в результате электронного перехода. Следовательно, из анализа распределения интенсивностей можно получить сведения о геометрии молекулы в возбужденном электронном состоянии.

Обычно для описания положения ядер в молекуле вводят так называемые естественные координаты [305, 306], в качестве которых обычно выбирают приращения длин связей и приращения углов между связями. Естественные и нормальные координаты линейным образом выражаются друг через друга: $r = Lq$. Методы расчета матрицы L для основного состояния молекулы хорошо разработаны. Элементы матрицы L для основного электронного состояния молекулы определяются из анализа ИК-спектров [264—269, 272].

Нормальные координаты возбужденного электронного состояния связаны с нормальными координатами основного согласно уравнению (2.4). Обращая это соотношение, находим $q = S^{-1}q' - S^{-1}d$. В естественных координатах имеем $r = LS^{-1}q' - LS^{-1}d$. Естественные координаты равновесной конфигурации возбужденного состояния получаем, полагая $q' = 0$. Следовательно, геометрическая структура возбужденного состояния легко находится по известной матрице L и параметрам, описывающим эффект Душинского [300]:

$$r_{\text{равн}} = -LS^{-1}d. \quad (7.1)$$

Знак в (7.1) несуществен ввиду произвольности знака δ (6.8). Так как параметры S и δ , вообще говоря, неоднозначно определяются из экспериментальных данных, то существует несколько возможных структур возбужденного состояния.

Для правильности интерпретации результатов необходима дополнительная информация, например анализ ротационной структуры полос. Отметим, что если молекула обладает группой симметрии, которая не нарушается при переходе, то в формулу (7.1) входят только полносимметричные колебания. Действительно, для неполносимметричных колебаний $d = 0$, а матрицы L и S из-за свойств симметрии имеют блочно-диагональный вид. В (7.1) входит только блок матрицы S , связывающий полносимметричные координаты молекулы в основном и возбужденном состояниях, и блок матрицы L , описывающий симметричные естественные координаты. Таким образом, наличие группы симметрии молекулы понижает размерность системы (7.1) и позволяет для восстановления геометрии возбужденного состояния использовать весь набор только полносимметричных колебаний.

§ 8. Запрещенные электронные переходы

Запрещенные электронные переходы, для которых в приближении Борна — Оппенгеймера выполняется условие

$$R_{e'e}(q_0) = \int \Psi_e^{*'}(x, q_0) M_e \Psi_e(x, q_0) d\tau_x = 0, \quad (8.1)$$

где $\Psi_e(x, q)$ — электронная волновая функция, M_e — оператор электрического дипольного момента, $d\tau_x$ — элемент электронного конфигурационного пространства, возможны в многоатомных молекулах по той причине, что в них могут возбуждаться неполносимметричные колебания, понижающие симметрию молекулы по сравнению с равновесной (q_0). При этом произведение колебательных волновых функций $|v\rangle$ и $|v'\rangle$ неполносимметрично по отношению к тем операциям симметрии, к которым неполносимметрично выражение $\Psi_e^{*'} M_e \Psi_e$ (или по крайней мере одна из его компонент).

Следуя Герцбергу и Теллеру [275], разложим электронный момент перехода $R_{e'e}(q)$ в ряд по нормальным координатам около положения равновесия ядер молекулы. Соответствующее разложение матричного элемента момента перехода $\langle v' | R_{e'e}(q) | v \rangle$ будет, с учетом (8.1), иметь вид

$$\langle v' | R_{e'e}(q) | v \rangle = \sum_{a=1}^{N_a} c_a \langle v' | q_a | v \rangle + \dots, \quad (8.2)$$

где $c_a = (\partial R_{e'e}(q) / \partial q_a)_0$. Суммирование в (8.2) ведется только по неполносимметричным координатам q_a , так как для полносимметричных координат $(\partial R_{e'e}(q) / \partial q_s)_0 = 0$ (N_a — число неполносимметричных мод). Кроме того, фактически только те q_a в (8.2) следует принимать во внимание, присутствие которых удовлетворяет групповым правилам отбора.

Если симметрия молекулы не меняется в результате электронного перехода, то, как указано выше, матрица S (2.4) принимает блочно-диагональный вид. При этом каждый блок описывает эффекты смешивания координат, преобразующихся по одному и тому же неприводимому представлению точечной группы симметрии молекулы. В этом случае матричный элемент $\langle v' | q_a | v \rangle$, входящий в (8.2), также факторизуется:

$$\langle v' | q_a | v \rangle = \langle v'_s | v_s \rangle \langle v'_a | q_a | v_a \rangle. \quad (8.3)$$

Здесь v_s и v_a — совокупность квантовых чисел, отвечающих полносимметричным и неполносимметричным колебаниям соответственно.

Выделение интеграла перекрытия $\langle v'_s | v_s \rangle$ для полносимметричных колебаний типа (8.3) было получено Крейгом [287] при анализе спектра бензола. Отметим, что момент перехода допускает также дальнейшую факторизацию относительно тех неполносим-

метричных колебаний, координаты которых не входят в сумму (8.2). Формула (8.3) позволяет заключить, что характер распределения интенсивностей во всех прогрессиях данного полносимметричного колебания, возбуждающегося совместно с различными неполносимметричными колебаниями, должен быть в рассматриваемом приближении одним и тем же («скейлинг» в распределении интенсивностей).

Так, в случае перехода $B_{2u} - A_{1g}$ в бензоле распределение интенсивностей полос в различных сериях, в которых возбуждается полносимметричное колебание с частотой $\omega_s = 923 \text{ см}^{-1}$ (см. [308]), должно, в рамках приближения (8.2), подчиняться указанному скейлингу. Действительно, экспериментальные данные указывают на некоторое качественное подобие распределений. Однако количественные расчеты, как показывает табл. 1—5 (см. ниже), не подтверждают достаточно убедительно такого рода скейлинг.

В этой связи учтем феноменологически эффекты второго порядка по электронно-колебательному взаимодействию, разложив момент перехода до членов второго порядка по нормальным координатам:

$$R_{e'e}(q) = \sum_{a=1}^{N_a} c_a q_a + \sum_{i,j=1}^N d_{ij} q_i q_j, \quad (8.4)$$

где $d_{ij} = 1/2 (\partial^2 R_{e'e}(q) / \partial q_i \partial q_j)_0$. Члены второго порядка отвечают эффекту электрического ангармонизма [312].

Выделим в (8.4) в квадратичных членах полносимметричные координаты:

$$\sum_{i,j=1}^N d_{ij} q_i q_j = \sum_{s_1, s_2=1}^{N_s} d_{s_1 s_2} q_{s_1} q_{s_2} + \sum_{a=1}^{N_a} \sum_{s=1}^{N_s} d_{as} q_a q_s + \sum_{a_1, a_2=1}^{N_a} d_{a_1 a_2} q_{a_1} q_{a_2}. \quad (8.5)$$

Очевидно, члены с $q_s q_s$ вклада в матричный элемент перехода не дают, так как чисто электронный переход запрещен. Члены вида $q_a q_s$ преобразуются по тому же представлению Γ_a точечной группы, что и q_a . Следовательно, они дают ненулевой вклад в матричный элемент, если соответствующее колебание q_a разрешено правилами отбора. Члены вида $q_{a_1} q_{a_2}$ преобразуются по представлению $\Gamma_{a_1} \otimes \Gamma_{a_2}$. Они дают вклад в матричный элемент перехода, если в разложении $\Gamma_{a_1} \otimes \Gamma_{a_2}$ на неприводимые представления содержится хотя бы одно представление Γ_a , удовлетворяющее правилам отбора.

Учет членов второго порядка по электронно-колебательному взаимодействию аналогичен учету возможности смешивания в матрице S полносимметричных и неполносимметричных колебаний. Наличие недиагональных блоков в матрице, описывающих эффекты смешивания координат различной симметрии, указывает на то, что в возбужденном состоянии точная симметрия основного состояния будет несколько нарушена. Отметим, что учет этого

малого нарушения симметрии может быть произведен путем использования итерационного метода, описанного в § 5.

Матричный элемент $\langle v' | R_{e'e}(q) | v \rangle$ с учетом (8.4), (8.5) и в пренебрежении вкладом от $q_{a_1} q_{a_2}$ принимает вид

$$\langle v' | R_{e'e}(q) | v \rangle = \sum_{a=1}^{N_a} c_a \langle v'_a | q_a | v_a \rangle \langle v'_s | \left(1 + \sum_{s=1}^{N_s} \beta_{as} q_s \right) | v_s \rangle, \quad (8.6)$$

где $\beta_{as} = d_{as}/c_a$. В отличие от (8.3), относительные интенсивности полносимметричных колебаний определяются теперь неуниверсальным параметром β_{as} , т. е. существенно зависят от того неполносимметричного колебания, совместно с которым они возбуждаются.

Таким образом, задача расчета распределения интенсивностей полос сводится прежде всего к необходимости вычисления матричных элементов вида $\langle v' | q_j | v \rangle$. Выражая оператор координаты q_j через операторы уничтожения и рождения a_j, a_j^\dagger , являющиеся генераторами группы динамической симметрии гамильтониана, получим

$$\langle v' | q_j | v \rangle = (\hbar/2\omega_j)^{1/2} [(v_j + 1)^{1/2} \langle v' | v_1, \dots, v_j + 1, \dots, v_N \rangle + v_j^{1/2} \langle v' | v_1, \dots, v_j - 1, \dots, v_N \rangle], \quad (8.7)$$

причем входящие в (8.7) интегралы перекрытия вычисляются по формулам § 4.

Учет вклада членов вида $q_{a_1} q_{a_2}$ приводит к необходимости вычисления интегралов перекрытия $\langle v' | q_i q_j | v \rangle$. Используя опять генераторы группы G , находим

$$\begin{aligned} \langle v' | q_i q_j | v \rangle &= \\ &= \frac{\hbar}{2} (\omega_i \omega_j)^{-1/2} [(v_i + 1)^{1/2} (v_j + 1)^{1/2} \langle v' | v_1, \dots, v_i + 1, \dots, v_j + \\ &+ 1, \dots, v_N \rangle + v_i^{1/2} (v_j + 1)^{1/2} \langle v' | \dots, v_i - 1, \dots, v_j + 1, \dots \rangle + \\ &+ (v_i + 1)^{1/2} v_j^{1/2} \langle v' | \dots, v_i + 1, \dots, v_j - 1, \dots \rangle + \\ &+ (v_i v_j)^{1/2} \langle v' | \dots, v_i - 1, \dots, v_j - 1, \dots \rangle]. \quad (8.8) \end{aligned}$$

Входящие в (8.8) интегралы перекрытия также вычислены в § 4.

С учетом связи (2.5) операторов a_i, a_i^\dagger и b_k, b_k^\dagger формулы (8.7), (8.8) могут быть представлены также как результат действия операторов b_k, b_k^\dagger на волновые функции конечного состояния.

Формула (8.6) принимает простой вид в случае возбуждения, наряду с одним квантом, подходящего неполносимметричного колебания (целой прогрессии только одной полносимметричной моды). Из (8.6) с учетом (8.7) находим, в частности,

$$\begin{aligned} \langle v'_s, 1_a | R_{e'e}(q) | 0_s, 0_a \rangle &= \\ &= K \left[H_{v'_s} \left(x'_s \right) + \gamma \frac{v'_s}{(\Delta'_s)^{1/2}} H_{v'_s-1} \left(x'_s \right) \right] \frac{(\Delta'_s)^{v'_s/2}}{(v'_s!)^{1/2}}, \quad (8.9) \end{aligned}$$

где K — множитель, не зависящий от ν'_s , а x'_s и Δ'_s введены в (6.1), (6.2). Константа γ возникает при учете вклада электронно-колебательного взаимодействия во втором порядке (учет членов вида $q_a q_s$), хотя сама пропорциональна первой степени этого взаимодействия. Для γ справедлива оценка $\gamma \sim (m_{\text{эл}} \omega_{\text{эл}} / m_{\text{яд}} \omega_{\text{кол}})^{1/2}$, где $m_{\text{эл}}$ и $m_{\text{яд}}$ — масса электрона и средняя масса ядра; $\omega_{\text{эл}}$, $\omega_{\text{кол}}$ — частоты электронного и колебательного переходов. Из (8.9) видно, что в случае малых Δ учет второго члена может быть существенным.

Применим изложенную выше схему к расчету распределения интенсивностей некоторых вибронных серий, возникающих в спектре бензола в результате запрещенного электронного перехода $B_{2u} - A_{1g}$ в системе 2600 Å. Интенсивности вибронных полос в прогрессиях полносимметричных колебаний для серий A , B , E , M (обозначения по Ингольду [308]) известны экспериментально [307—311].

Рассчитаем, следуя (8.3), распределение интенсивностей для этих полос [300]. Для этого по формулам (6.1) находим величины u'_s и Δ'_s , используя экспериментальные значения относительных интенсивностей $q(1_s; 0)$ и $q(2_s; 0)$. Интенсивности остальных переходов вычисляем по (6.2) или (6.2a).

В качестве критерия применимости гармонического приближения вычисляем по формуле (6.5) теоретическую сумму $S_{\text{теор}}$ относительных интенсивностей всех возможных полос данной

прогрессии: $S_{\text{теор}} = \sum_{\nu'_s=0}^{\infty} q(\nu'_s; 0)$ — и сопоставляем ее с сум-

мой $S_{\text{эксп}}$ относительных интенсивностей экспериментально зафиксированных полос. Разность $S_{\text{теор}} - S_{\text{эксп}}$ показывает, какова

Таблица 1

Интенсивности вибронных полос
в системе 2600 Å спектра бензола (E-серия)

Частота, см ⁻¹	Колебательное отношение [308]	Относительная интенсивность			
		эксперимент [308]	теория	эксперимент [309]	теория
39 560,8	E_0^0	1,000	1,000	1,00	1,00
40 482,7	E_1^0	1,126	1,126	1,31	1,31
41 402,3	E_2^0	0,906	0,906	0,89	0,89
42 318,3	E_3^0	0,342	0,597	0,46	0,41
43 241,3	E_4^0	—	0,348	—	0,15
44 164,3	E_5^0	—	0,183	—	0,04
45 087,3	E_6^0	—	0,092	—	0,01

**Интенсивности вибронных полос
в системе 2600 Å спектра бензола (U-серия)**

Частота, см ⁻¹	Колебательное отнесение [308]	Относительная интенсивность	
		эксперимент [308]	теория
39 134,2	U_0^0	1,00	1,00
40 050,2	U_1^0	1,46	1,46
40 968,5	U_2^0	1,77	1,77
41 884,5	U_3^0	1,15	1,80
42 800,9	U_4^0	1,00	1,68
43 716,6	U_5^0	0,28	1,45
44 639,6	U_6^0	—	1,19

Таблица 3

**Интенсивности вибронных полос
в системе 2600 Å спектра бензола (B-серия)**

Частота, см ⁻¹	Колебательное отнесение [308]	Относительная интенсивность	
		эксперимент [308]	теория
37 481,9	B_0^0	1,000	1,000
38 407,0	B_1^0	1,309	1,309
39 330,6	B_2^0	0,833	0,833
40 250,4	B_3^0	0,763	0,343
41 173,5	B_4^0	0,131	0,103
42 096,5	B_5^0	—	0,024
43 019,5	B_6^0	—	0,004
43 942,5	B_7^0	—	0,001

возможность наблюдения следующих полос данной прогрессии. Результаты вычисления приведены в табл. 1—5.

Согласие с экспериментом удовлетворительное. Более тщательный анализ потребовал бы учета вклада второго порядка по электронно-колебательному взаимодействию (см. (8.9)). Для этого необходимы более точные эксперименты по относительным интенсивностям.

Интенсивности вибронных полос в системе 2600 Å спектра бензола (М-серия)

Частота, см ⁻¹	Колебательное отнесение [308]	Относительная интенсивность			
		эксперимент [308]	теория	эксперимент [309]	теория
38343,4	M_0^0	1,000	1,000	1,00	1,00
39255,1	M_1^0	1,454	1,454	1,14	1,14
40177,7	M_2^0	1,121	1,121	1,00	1,00
41099,7	M_3^0	0,424	0,608	—	0,73
42018,9	M_4^0	0,166	0,260	—	0,48
42941,9	M_5^0	—	0,093	—	0,29
43864,9	M_6^0	—	0,029	—	0,16
44787,9	M_7^0	—	0,008	—	—
45710,9	M_8^0	—	0,002	—	—

Таблица 5

Интенсивности вибронных полос в системе 2600 Å спектра бензола (А-серия)

Частота, см ⁻¹	Колебательное отнесение [308]	Относительная интенсивность			
		пары		раствор	
		эксперимент [311]	теория	эксперимент [310]	теория
38612,2	A_0^0	1,000	1,000	1,000	1,000
39534,2	A_1^0	1,344	1,344	1,452	1,452
40456,0	A_2^0	1,034	1,034	1,122	1,122
41377,9	A_3^0	0,534	0,592	—	0,612
42297,9	A_4^0	0,206	0,280	—	0,264
43215,8	A_5^0	0,060	0,115	—	0,095
44133,0	A_6^0	0,017	0,042	—	0,030
45050,4	A_7^0	—	0,014	—	0,009
45973,4	A_8^0	—	0,005	—	0,002

§ 9. Вибронный переход в трехатомной молекуле вида XY_2

Нелинейная молекула вида XY_2 имеет форму равнобедренного треугольника с атомом X при вершине. Эта молекула обладает тремя нормальными колебаниями ω_1 , ω_2 , ω_3 . Молекула допускает точечную группу симметрии C_{2v} , состоящую из преобразований:

тождественного, отражения в плоскости молекулы, поворота на 180° вокруг высоты, опущенной на основание треугольника, и, наконец, отражения в плоскости с поворотом на 180° . Оказывается, что два колебания, ω_1 и ω_2 , являются полносимметричными, а колебание ω_3 неполносимметрично — его нормальная координата меняет знак при повороте и не меняет при отражении в плоскости. Если симметрия молекулы сохраняется при вибронном переходе, то, очевидно, мода ω_3 не может смешиваться с полносимметричными модами. Это приводит к тому, что матрица S , описывающая эффект Душинского, превращается в матрицу поворота на угол χ вокруг оси Z в пространстве нормальных координат. Свойства симметрии моды ω_3 требуют обращения в нуль третьей проекции вектора d , входящего в (2.4). Вибронный переход, сохраняющий симметрию, приводит к изменению частот, положений равновесия и смешиванию только двух полносимметричных мод, ω_1 и ω_2 , а мода ω_3 может претерпевать в результате перехода только изменение частоты. Таким образом, полносимметричные колебания описываются двумерным осциллятором [288]. Полносимметричные колебания в начальном электронном состоянии описываются в нормальных координатах гамильтонианом вида

$$\mathcal{H}_{in} = 1/2(p_1^2 + p_2^2) + 1/2(\omega_1^2 q_1^2 + \omega_2^2 q_2^2). \quad (9.1)$$

Здесь ω_1 и ω_2 — собственные частоты этих колебаний.

В результате электронного перехода конечное колебательное состояние системы будет характеризоваться гамильтонианом вида

$$\mathcal{H}_f = 1/2(p_1'^2 + p_2'^2) + 1/2(\Omega_1^2 q_1'^2 + \Omega_2^2 q_2'^2). \quad (9.2)$$

Нормальные координаты основного и возбужденного состояний связаны соотношением [288]

$$q' = Sq + d, \quad (9.3)$$

где S — ортогональная матрица 2-го порядка — имеет вид

$$S = \begin{vmatrix} \cos \chi & \sin \chi \\ -\sin \chi & \cos \chi \end{vmatrix}.$$

Преобразование (9.3), связывающее нормальные координаты первого и второго осцилляторов, естественным образом индуцирует линейное каноническое преобразование операторов рождения и уничтожения первого осциллятора a_i^\dagger , a_i через соответствующие операторы второго осциллятора. Линейное преобразование (9.3) принадлежит группе динамической симметрии $\text{Sp}(4, R) \wedge H(2)$ и осуществляется с помощью унитарного оператора Σ , принадлежащего представлению этой же группы: $b_i = \Sigma^\dagger a_i \Sigma$; $b_i^\dagger = \Sigma^\dagger a_i^\dagger \Sigma$, $i = 1, 2$. Учитывая структуру преобразования (9.3), оператор Σ можно представить в виде произведения

операторов [294]:

$$\Sigma = S_t S_t^\dagger S_\chi S_{\tau'}. \quad (9.4)$$

Операторы S_τ и $S_{\tau'}$, соответствующие растяжению осей, даются выражениями

$$S_\tau = \exp [1/2 \tau_i (a_i^2 - (a_i^\dagger)^2)]; \quad S_{\tau'} = \exp [1/2 \tau'_i (a_i^2 - (a_i^\dagger)^2)], \quad (9.5a)$$

где $\tau_i = 1/2 \ln \omega_i$, $\tau'_i = 1/2 \ln \Omega_i$. Оператор S_χ является оператором поворота на угол χ и, очевидно, задается формулой

$$S_\chi = \exp [\chi (-a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1)]. \quad (9.5b)$$

Для интегралов перекрытия стационарных состояний имеем [294]

$$\langle v', f | v, \text{in} \rangle = \langle v', f | \Sigma | v, f \rangle = \langle v', \text{in} | \Sigma | v, \text{in} \rangle. \quad (9.6)$$

Получение фактора Франка — Кондона в данной задаче сводится к вычислению интеграла перекрытия $\langle v'_1, v'_2 | v_1, v_2 \rangle$ для двумерного осциллятора. Интеграл перекрытия $\langle \gamma | \alpha \rangle$ между когерентными состояниями представляет собой гауссов интеграл, который вычислен ранее (см. (4.1)). Амплитуда 00 — 00-перехода равна

$$\langle 0, 0 | 0, 0 \rangle = 2\Delta^{-1} (\omega_1 \omega_2 / \Omega_1 \Omega_2)^{1/4} \exp [-\delta (1 - P)\delta/2]. \quad (9.7)$$

Амплитуда $v'_1 v'_2 - v_1 v_2$ -перехода была получена в (4.3). Приведем явные выражения для матрицы P , входящей в (4.4) (см. [294, 298]):

$$P = \Delta^{-1} \left\| \begin{array}{cc} \frac{\omega_2 + \Omega_2}{\Omega_2} + \frac{\omega_2 - \omega_1}{\Omega_2} \sin^2 \chi & \frac{\omega_2 - \omega_1}{2\sqrt{\Omega_1 \Omega_2}} \sin 2\chi \\ \frac{\omega_2 - \omega_1}{2\sqrt{\Omega_1 \Omega_2}} \sin 2\chi & \frac{\omega_1 + \Omega_2}{\Omega_1} + \frac{\omega_2 - \omega_1}{\Omega_1} \sin^2 \chi \end{array} \right\|, \quad (9.8)$$

где величина Δ есть

$$\Delta = (\Omega_1 \Omega_2)^{-1} [(\omega_1 + \Omega_1)(\omega_2 + \Omega_2) + (\omega_2 - \omega_1)(\Omega_2 - \Omega_1) \sin^2 \chi]. \quad (9.9)$$

Матрица Q получается из P посредством замен $\omega_i \leftrightarrow \Omega_i$ и $\chi \rightarrow -\chi$ ($i = 1, 2$). Матрица R легко находится по формуле (4.2) или (6.13). Явные выражения матриц Q и R приведены в [294, 298]. Сдвиг δ связан с d соотношениями

$$\delta_1 = \sqrt{\Omega_1/\hbar} d_1; \quad \delta_2 = \sqrt{\Omega_2/\hbar} d_2. \quad (9.10)$$

Формула Герцберга — Теллера для парциальной интенсивности 0 — 0-перехода существенно видоизменяется в случае двумерных колебаний. Именно [294],

$$\frac{|\langle 0, 0 | 0, 0 \rangle|^2}{\sum_{v_1, v_2} |\langle v'_1, v'_2 | 0, 0 \rangle|^2} = \frac{|\langle 0, 0 | 0, 0 \rangle|^2}{\sum_{v_1, v_2} |\langle 0, 0 | v_1, v_2 \rangle|^2} = 4\Delta^{-1} \sqrt{\frac{\omega_1 \omega_2}{\Omega_1 \Omega_2}} \exp [-\delta (1 - P)\delta]. \quad (9.11)$$

При $\delta = 0$ и $\chi = 0$ выражение (9.11) переходит в произведение двух множителей, вычисленных по формуле Герцберга — Теллера для двух колебательных переходов.

При наличии только одной колебательной моды одномодовая парциальная интенсивность $\nu_1^0 - 00$ -перехода дается (6.5), где $k = 1$. Аналогичные выражения для перехода $0\nu_2^0 - 00$ следуют из (6.5) в результате замены индекса k на 2. Формула (6.5) при $\delta = 0$ и $\chi = 0$ дает непосредственно парциальные интенсивности Герцберга — Теллера $2\sqrt{\omega_1\Omega_1}/(\omega_1 + \Omega_1)$ и $2\sqrt{\omega_2\Omega_2}/(\omega_2 + \Omega_2)$ соответственно. Рассмотрим в качестве примера некоторые вибронные переходы в молекулах SO_2 , BS_2 и ZnTi_2 , следуя [294].

Уоткинсом [289] были выполнены измерения относительной интенсивности вибронных полос в системах 1227, 1269 и 1340 Å в спектре поглощения молекулы SO_2 . Во всех этих системах $\nu_1 = \nu_2 = 0$. Вначале рассмотрим системы 1227 и 1269 Å (см. табл. 6). Используя уравнения (6.3) и (6.4), находим (при условии $q(0,0) = 1$) параметры $[(1 - P)\delta]_2$ и P_{22} по измеренным интенсивностям переходов $01-00$ и $02-00$. Найденные параметры используем затем для нахождения интенсивностей остальных переходов по формулам (6.2a). Результаты приведены в табл. 6. Предположение $q(0,0) = 1$ в системе 1227 Å было независимо проверено путем непосредственного расчета интенсивности перехода $00 - 00$ по измеренным значениям интенсивностей переходов $01 - 00$, $03 - 00$, $05 - 00$.

Таблица 6

Интенсивности вибронных полос в системах молекулы SO_2

Система полос, Å	Частота, см ⁻¹	Колебательное отношение (ν_1, ν_2)	Относительная интенсивность	
			эксперимент	теория
1269	78 772	(0,0)	1,00	1,00
	79 172	(0,1)	2,62	2,62
	79 570	(0,2)	3,09	3,09
	79 969	(0,3)	2,17	2,15
	80 368	(0,4)	0,99	0,96
	—	(0,5)	—	0,29
	—	(0,6)	—	0,02
	—	(0,7)	—	0,006
1227	—	(0,0)	—	1,00
	81 487	(0,1)	4,07	4,07
	81 879	(0,2)	7,70	7,70
	82 273	(0,3)	8,96	8,96
	82 666	(0,4)	7,14	7,14
	83 069	(0,5)	4,10	4,10
	83 448	(0,6)	1,73	1,73
	—	(0,7)	—	0,54

В качестве критерия применимости гармонического приближения можно использовать правило сумм (6.5). Действительно, вычисляя сумму найденных экспериментально относительных интенсивностей $S_{\text{эксп}} = \sum_{v_2} |\langle 0, v_2 | 0, 0 \rangle \langle 0, 0 | 0, 0 \rangle|^2$ и сравнивая ее с такой же теоретической суммой (см. уравнение (6.5), где параметры P_{22} и $[(1 - P)\delta]_2$, входящие в правую часть, уже найдены), мы получаем:

$$1227 \text{ \AA}: S_{\text{эксп}} = 33,80, \quad S_{\text{теор}} = 35,38;$$

$$1269 \text{ \AA}: S_{\text{эксп}} = 9,82, \quad S_{\text{теор}} = 10,17.$$

Разность $S_{\text{теор}} - S_{\text{эксп}}$ показывает, какая часть интенсивности приходится на неизмеренные переходы. Сравнение результатов говорит о том, что $S_{\text{эксп}}$ хорошо аппроксимирует $S_{\text{теор}}$.

Этим же способом были проанализированы система полос 7210 \AA в спектре поглощения молекулы BS_2 [315а] и система 6270 \AA в спектре излучения молекулы ZnTl_2 [315б]. Расчеты были проделаны в соответствии с уравнениями (6.2а). В табл. 7 и 8 приведены результаты расчетов. В этом случае имеем:

$$7210 \text{ \AA}: S_{\text{эксп}} = 4,46, \quad S_{\text{теор}} = 5,16;$$

$$6270 \text{ \AA}: S_{\text{эксп}} = 3,1, \quad S_{\text{теор}} = 3,3.$$

Проведение более полного анализа возможно для системы полос 1340 \AA в спектре поглощения молекулы SO_2 . Прежде всего был определен, согласно (6.6), параметр P_{12} , который равен $0,507 \cdot 10^{-3}$. Это означает, что угол смешивания очень мал: $\chi = 17,5'$. Теперь, подставляя найденный угол χ в соотношение (9.8), определяем все элементы матрицы P_{ij} . Параметры $[(1 - P)\delta]_1$

Таблица 7

Интенсивности вибранных полос в системе 7210 \AA молекулы BS_2

Частота, см ⁻¹	Колебательное отнесение (v_1, v_2)	Относительная интенсивность	
		эксперимент	теория
13 896	(0, 0)	1,00	1,00
14 371	(1, 0)	1,08	1,08
14 877	(2, 0)	0,98	0,98
15 377	(3, 0)	0,86	0,75
15 878	(4, 0)	0,39	0,53
16 376	(5, 0)	0,11	0,34
16 877	(6, 0)	0,03	0,21
17 367	(7, 0)	—	0,13
—	(8, 0)	—	0,07

Интенсивности вибронных полос в системе 6270 Å молекулы $ZnTi_2$

Частота, cm^{-1}	Колебательное отнесение (v_1, v_2)	Относительная интенсивность	
		эксперимент	теория
16 097	(0,0)	1,0	1,0
16 135	(1,0)	1,1	1,1
16 168	(2,0)	0,7	0,7
16 200	(3,0)	0,3	0,3
—	(4,0)	—	0,1
—	(5,0)	—	0,03

и $[(1 - P)\delta]_2$ вычисляем по формуле (6.3). Интенсивности остальных переходов вычисляем с помощью рекуррентных соотношений. Интенсивности 02 — 00-перехода были вычислены по формуле (6.2) и интенсивности 12 — 00-перехода определялись из рекуррентного соотношения (4.136). Результаты вычислений приведены в табл. 9. Сдвиги δ_1 и δ_2 вычисляем, решая систему (6.3), $k = 1, 2$.

Таблица 9

Интенсивности вибронных полос в системе 1340 Å молекулы SO_2

Частота, cm^{-1}	Колебательное отнесение (v_1, v_2)	Относительная интенсивность	
		эксперимент	теория
74 599	(0,0)	1,00	1,00
74 948	(0,1)	1,39	1,39
75 290	(0,2)	0,71	0,72
75 667	(1,0)	0,91	0,91
76 002	(1,1)	1,27	1,27
76 315	(1,2)	0,65	0,66
—	(2,0)	—	0,45
—	(0,3)	—	0,15

Для нахождения геометрической структуры возбужденного состояния молекулы типа XU_2 , исходя из известной конфигурации основного состояния, введем естественные координаты $\mathbf{r} = (r_1, r_2)$, описывающие полносимметричные колебания. Здесь r_1 есть величина растяжения связей $X - Y$, а r_2 определено как $r_2 = r_0 \Delta\alpha$, где $\Delta\alpha$ — изменение угла YXY . Естественные и нормальные координаты связаны посредством матрицы L , $\mathbf{r} = L\mathbf{q}$, явный

вид которой следующий [264, 265]:

$$L = \left\| \begin{array}{cc} g_1 \omega_1 (g_1^2 c_{11} + c_{22})^{-1/2} & g_2 \omega_2 (g_2^2 c_{11} + c_{22})^{-1/2} \\ \omega_1 (g_1^2 c_{11} + c_{22})^{-1/2} & \omega_2 (g_2^2 c_{11} + c_{22})^{-1/2} \end{array} \right\|.$$

Здесь $C \equiv \| c_{ij} \|$ ($i, j = 1, 2$) — матрица потенциальной энергии $2V = \mathbf{r}C\mathbf{r}$, элементы которой (пренебрегая c_{12}) находим из секулярного уравнения

$$\omega_1^2 + \omega_2^2 = h_{11}c_{11} + h_{22}c_{22}, \quad \omega_1^2\omega_2^2 = (h_{11}h_{22} - h_{12}^2)c_{11}c_{22};$$

$H \equiv \| h_{ij} \|$ есть матрица кинетической энергии $2T = \dot{\mathbf{r}}H^{-1}\dot{\mathbf{r}}$ [265]:

$$h_{11} = \frac{1}{2m_Y} + \frac{2}{2m_X}(1 + \cos \alpha); \quad h_{22} = \frac{2}{m_Y} + \frac{2}{m_X}(1 - \cos \alpha);$$

$$h_{12} = h_{21} = -\frac{\sin \alpha}{m_X},$$

где m_X и m_Y — массы атомов X и Y соответственно. Равновесная геометрическая конфигурация возбужденного состояния относительно известной конфигурации основного состояния находится из равенства $\mathbf{r}_{\text{равн}} = LS^{-1}\mathbf{d}$. Выражая \mathbf{d} через δ согласно (6.10), можно найти, в соответствии с (7.1), длину и угол связи S—O для возбужденного электронного состояния. Таким образом, $r = 1,483 \text{ \AA}$ и $\alpha = 125^\circ 30'$. Частоты и геометрическая структура основного состояния, необходимые для вычислений L , были взяты из работы [288]. Приведем также значения экспериментальной и теоретической сумм интенсивностей для каждой прогрессии:

$$\begin{array}{ll} S_{\text{эксп}} = 1,91, & S_{\text{теор}} = 2,40; \\ S_{\text{эксп}} = 3,11, & S_{\text{теор}} = 3,27. \end{array}$$

Для того чтобы подобный анализ можно было выполнить для систем полос 1227 и 1269 \AA , необходимо дополнительное экспериментальное нахождение интенсивности перехода 10 — 00.

Таблица 10

Интенсивности вибронных полос в системе 3700 \AA молекулы SO_2

Частота, см ⁻¹	Колебательное отношение (v_1, v_2)	Относительная интенсивность	
		эксперимент	теория
25 776	(0, 0)	1,000	1,000
26 137	(0, 1)	1,223	1,223
26 494	(0, 2)	0,594	0,556
26 682	(1, 0)	1,323	1,323
27 033	(1, 1)	1,602	1,602
—	(2, 0)	—	0,724

Изложенная схема может быть применена для расчета в системе полос поглощения 3700 Å молекулы SO₂ [288]. Результаты приведены в табл. 10. Для сумм интенсивностей $S_{\text{теор}}$ и $S_{\text{эксп}}$ каждой прогрессии получаем:

$$S_{\text{эксп}} = 2,323, \quad S_{\text{теор}} = 3,278;$$

$$S_{\text{эксп}} = 2,817, \quad S_{\text{теор}} = 2,870.$$

Расчет геометрической структуры возбужденного состояния приводит к следующим значениям длины связи и угла: $r' = 1,490$ Å; $\alpha = 124^\circ, 57'$. Эти результаты хорошо совпадают со структурой, найденной с помощью ротационного анализа [288]. В основном электронном состоянии молекулы SO₂ длина связи S—O $r = 1,432$ Å и угол $\alpha = 119^\circ 32'$.

§ 10. Правила сумм для вибронных переходов

В этом параграфе рассмотрим, следуя работе [301], некоторые правила сумм и предельные распределения интенсивностей, полезные для обработки экспериментальных данных. Будем рассматривать переходы вида $v_k' - 0$, обычно отвечающие прогрессии полносимметричных колебаний. В этом случае интегралы перекрытия выражаются через полиномы Лагерра (6.2а).

В § 6 было найдено следующее правило сумм для факторов Франка — Кондона *):

$$S_k \equiv \sum_{v_k=0}^{\infty} \left| \frac{\langle v_k' | 0 \rangle}{\langle 0 | 0 \rangle} \right|^2 = (1 - 4\Delta_k'^2)^{-1/2} \exp\left(\frac{2u_k'\Delta_k'}{1 + 2\Delta_k'}\right). \quad (10.1)$$

Аналогичное выражение в терминах u_i и Δ_i имеет место для переходов $0 - v_i$. Если сдвиги d_k в (2.4) равны нулю и эффект смешивания нормальных координат отсутствует ($S_{ki} = \delta_{ki}$), то соотношение (10.1) дает формулу Герцберга — Теллера [275] для парциальной интенсивности $0 - 0$ -перехода. В предыдущих параграфах было показано, что распределение интенсивностей, вычисленное с помощью (6.2а), и правило сумм (10.1) хорошо согласуются с экспериментальными данными.

В последующем будем для определенности рассматривать спектр поглощения, опустив при этом штрихи и индексы у соответствующих величин. Переход к случаю спектра испускания очевиден и сводится к замене $(I_{v_k'v_i}^{\text{abs}}/I_{00}^{\text{abs}}) \rightarrow (\Omega_{00}/\Omega_{v_k'v_i})^3 (I_{v_k'v_i}^{\text{em}}/I_{00}^{\text{em}})$.

*) Символ $|v_i\rangle$ используется как сокращенная запись колебательного состояния $|0_1, \dots, v_i, \dots, 0_N\rangle$, в котором возбуждена только 1-я колебательная мода (N — число колебательных степеней свободы). Такое же соглашение принято для обозначения вибронных переходов вида $v_k' - v_i$ между i -м и k -м колебательными уровнями двух электронных состояний (см. стр. 199).

Обычно экспериментально измеряют только относительные интенсивности вибронных полос, поэтому полезно ввести парциальные интенсивности

$$q(v) = \frac{|\langle v|0\rangle|^2}{\sum_{v=0}^{\infty} |\langle v|0\rangle|^2}, \quad (10.2)$$

удовлетворяющие условию нормировки $\sum_n q(v) = 1$. При $v = 0$ (10.2) переходит в парциальную интенсивность 0 — 0-перехода. Величины $q(v)$ являются вероятностями возбуждения различных колебательных уровней v при электронном переходе.

С помощью распределения (10.2) можно вычислить моменты колебательного квантового числа v :

$$\bar{v}^n = \sum_{v=0}^{\infty} v^n q(v). \quad (10.3)$$

Для среднего числа колебательных квантов \bar{v} и его дисперсии σ_v^2 имеем *)

$$\bar{v} = \frac{2\Delta}{1-4\Delta^2} \left(2\Delta + u \frac{1-2\Delta}{1+2\Delta} \right); \quad (10.4)$$

$$\sigma_v^2 \equiv \bar{v}^2 - (\bar{v})^2 = \frac{2\Delta}{(1+2\Delta)^2} \left[\frac{4\Delta}{(1-2\Delta)^2} + u \frac{1-2\Delta}{1+2\Delta} \right]. \quad (10.5)$$

Параметры Δ и u вычисляются по экспериментальным значениям интенсивностей двух первых переходов, I_{10} и I_{20} , в спектре поглощения:

$$\Delta = \frac{1}{2} \left[\frac{\Omega_{00}}{\Omega_{10}} \frac{I_{10}}{I_{00}} \mp \left(2 \frac{\Omega_{00}}{\Omega_{20}} \frac{I_{20}}{I_{00}} \right)^{1/2} \right]; \quad u = \frac{1}{2\Delta} \frac{\Omega_{00}}{\Omega_{10}} \frac{I_{10}}{I_{00}}. \quad (10.6)$$

Выбор определенного знака в формуле для Δ обычно фиксируется условием $|\Delta| < 1/2$.

В работах [311, 314] рассматривались моменты распределения частот переходов Ω_{v0} :

$$\bar{\Omega}^n = \sum_{v=0}^{\infty} \Omega_{v0}^n q(v).$$

Ограничиваясь линейным приближением $\Omega_{v0} = \Omega_{00} + \omega v$, находим среднюю частоту и ее дисперсию:

$$\bar{\Omega} = \Omega_{00} + \omega \bar{v}; \quad \sigma_{\Omega}^2 = \omega^2 \sigma_v^2,$$

*) Для получения \bar{v} и v^2 достаточно применить к левой и правой частям (10.2) оператор $D = \Delta \partial/\partial \Delta$ соответственно один и два раза.

где \bar{v} и $\bar{\sigma}_v^2$ даются формулами (10.4) и (10.5). В работе [311] величина $\bar{\Omega}$ была связана с геометрией возбужденного состояния молекулы.

Высшие моменты распределения частот могут быть вычислены с помощью производящей функции

$$G(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{\Omega}^n z^n = (1 - 4\Delta^2 w^2)^{-1/2} \exp\left(\Omega_{00} z + \frac{2u \Delta w}{1 + 2\Delta w}\right), \quad (10.7)$$

где $w = \exp(z\omega)$, по формуле

$$\bar{\Omega}^n = \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial z^n} G(z) \Big|_{z=0}. \quad (10.8)$$

Если в (10.7) положить $\Omega_{00} = 0$, $w = 1$, то получим производящую функцию для моментов \bar{v}^n (10.3).

Рассмотрим теперь некоторые предельные случаи распределения интенсивностей (10.2), которые оказываются полезными при анализе эксперимента. Предельные распределения интенсивностей в тех случаях, когда отсутствует эффект Душинского ($S_{ki} = \delta_{ki}$) и нет изменения частот нормальных колебаний ($\omega_i = \omega_i'$), а преобразование (2.4) сводится к сдвигам d_k , приведены в [250].

Распределение интенсивностей (10.2) будет пуассоновым, если

$$\frac{I_{00} I_{20}}{I_{10}^2} \approx \frac{\Omega_{00} \Omega_{20}}{2\Omega_{10}^2}$$

и интенсивность I_{10} не является аномально малой. Тогда $|\Delta| \rightarrow 0$ и $|u| \rightarrow \infty$, причем произведение $u\Delta$ остается постоянным. В этом случае имеем распределение Пуассона

$$q(v) = \frac{(\bar{v})^v}{v!} e^{-\bar{v}}, \quad (10.9)$$

где среднее число квантов \bar{v} равно

$$\bar{v} = \frac{\Omega_{00}}{\Omega_{10}} \frac{I_{10}}{I_{00}}. \quad (10.10)$$

В другом предельном случае, когда $u\Delta \gg 1$, $\|u\| \gg 1$, $(1 - 2|\Delta|)|u| \gg 1$, распределение (10.2) становится гауссовым:

$$q(v) = (2\pi\bar{\sigma}_v^2)^{-1/2} \exp\left[-(v - \bar{v})^2 / 2\bar{\sigma}_v^2\right], \quad (10.11)$$

где связь среднего числа квантов \bar{v} и дисперсии $\bar{\sigma}_v^2$ с экспериментальными данными приведена в (10.4), (10.5), (10.6).

Сравним полученные выше правила сумм (10.1), (10.4), (10.5), а также предельные формы распределения (10.12) с экспериментальными данными.

В работе [289] измерены интенсивности полос $0v_2'0 - 000$ в спектре поглощения молекулы SO_2 в области 1227 Å. Вычисление тех же интенсивностей по формуле (6.2а) привели к прекрасной

му согласно с экспериментом (см. [294] и табл. 7). В этом случае $\Delta = 0,073$, $u = 27,78$. Приведем значения S , $\bar{\nu}$, σ_{ν}^2 , вычисленные как по формулам (10.1), (10.4), (10.5), так и по экспериментальным интенсивностям:

$$S_{\text{теор}} = 35,38, \quad \bar{\nu}_{\text{теор}} = 3,04, \quad \sigma_{\nu}^2_{\text{теор}} = 2,34;$$

$$S_{\text{эксп}} = 33,80, \quad \bar{\nu}_{\text{эксп}} = 2,93, \quad \sigma_{\nu}^2_{\text{эксп}} = 2,79.$$

Полученные результаты показывают, что правило сумм для S выполняется с точностью $\sim 5\%$, а для $\bar{\nu}$ — с точностью $\sim 3\%$. На самом деле точность выполнения правила сумм может быть улучшена. Для этого необходимо измерить интенсивность следующего перехода с $\nu_2 = 7$. Теоретический расчет дает для

$|\langle 7|0\rangle\langle 0|0\rangle|^2$ величину 0,54, учет которой приводит к $S_{\text{эксп}} = 34,34$, $\bar{\nu}_{\text{эксп}} = 2,99$, т. е. к процентной точности. Распределение интенсивностей полос в спектре является пуассоновым ($\bar{\nu} \sim \sigma_{\nu}^2$).

Другим примером распределения Пуассона могут служить интенсивности ряда серий вибронных полос, возникающих при переходе $B_{2u} - A_{1g}$ в молекуле бензола. Возможность применения полученных выше формул к случаю запрещенного электронного перехода вытекает из того факта, что если данный переход не нарушает симметрию молекулы, то интегралы перекрытия допускают факторизацию вида $\langle \nu'_s, \nu'_a | \nu_s, \nu_a \rangle = \langle \nu'_s | \nu_s \rangle \langle \nu'_a | \nu_a \rangle$, где ν_s и ν_a — наборы колебательных квантовых чисел

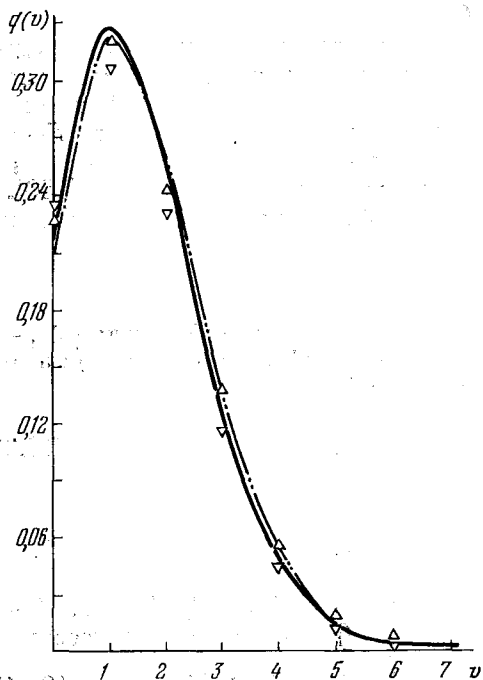


Рис. 1.

для полностью симметричных и не полностью симметричных мод. При этом начало прогрессии отвечает частоте $\Omega_{00} + \omega'_a \nu'_a$. Как отмечалось выше, введение естественной нормировки в (10.2) позволяет непосредственно сравнивать формы распределения интенсивностей, измеренных в различных экспериментах.

На рис. 1 сплошная кривая отвечает распределению Пуассона (10.9) с учетом (10.3) и (10.6). Точки соответствуют эксперимен-

тальным значениям факторов Франка — Кондона

$$q_{\text{эксп}}(v) = \frac{1}{S} \frac{\Omega_{00}}{\Omega_{v0}} \frac{I_{v0}}{I_{00}},$$

где S найдено по формуле (10.1) (см. [301]). Экспериментальные данные, необходимые для вычислений, взяты из работ [308—311]. Сплошная кривая и значок ∇ соответствуют спектру паров бензола, а штрих-пунктирная и значок Δ — раствору бензола.

Указанием на гауссов тип распределения интенсивностей (10.11) является переход в молекуле ClO_2 [290]. Быстрый рост интенсивностей с увеличением v качественно удовлетворяет критерию выполнимости распределения Гаусса.

На рис. 2 сплошная кривая отвечает параболе

$$\ln q(v) = \frac{(v - \bar{v})^2}{2\sigma_v^2} - \frac{1}{2} \ln(2\pi\sigma_v^2), \quad (10.12)$$

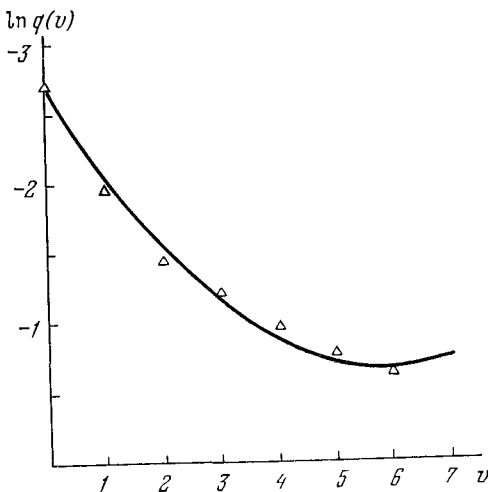


Рис. 2.

а точки представляют экспериментальные значения величин $\ln(I_{v0}\Omega_{00}/I_{00}\Omega_{v0}) - \ln S$. Величины \bar{v} и σ_v^2 находятся из эксперимента по формулам (10.4) — (10.6) [290], а S — согласно (10.1). Так как диссоциационный предел находится вблизи энергии $E \approx \approx \hbar\omega\bar{v}$, то существует только левая ветвь параболы.

Следует отметить, что в случае значительного роста интенсивностей с увеличением v не всегда достигается достаточная точность вычисления параметров μ и Δ по формулам (10.6). В таких ситуациях величины \bar{v} и σ_v^2 из (10.11) могут быть найдены путем проведения по методу наименьших квадратов параболы

$$y_v = - \frac{(v - \bar{v})^2}{2\sigma_v^2} + \ln S (2\pi\sigma_v^2)^{-1/2},$$

где y_v находятся по экспериментальным интенсивностям:

$$y_v = \ln \frac{\Omega_{00}}{\Omega_{v0}} \frac{I_{v0}}{I_{00}}.$$

Отметим, что величины \bar{v} и σ_v^2 , вычисленные по экспериментальным значениям интенсивностей и частот, позволяют, согласно

(10.4), (10.5), найти параметры u , Δ , которые, как указывалось в § 6, необходимы для восстановления параметров преобразования Душинского (2.4).

Полученные правила сумм, как и результаты для самих относительных интенсивностей, справедливы и в случае колебательной структуры ядерного γ -перехода, связанной с испусканием γ -кванта ядром многоатомной молекулы. Ряд вопросов, касающихся указанной структуры, обсуждался в недавних работах [331].

§ 11. Вырожденные вибронные переходы

Прицип Франка — Кондона [273, 274], сформулированный вначале для двухатомных молекул, был распространен Герцбергом и Теллером [275] на многоатомные молекулы. Среди многоатомных молекул имеются молекулы, содержащие одинаковые атомы и допускающие некоторую точечную группу симметрии. Тогда различные моды колебаний такой молекулы можно классифицировать с помощью неприводимых представлений точечной группы симметрии молекулы. Так как среди неприводимых представлений точечных групп имеются двумерные и трехмерные, то отвечающие им неполносимметричные моды обладают двукратно или трехкратно вырожденными частотами. Характер вибронного перехода существенно зависит от типа симметрии возбуждаемых мод. Обычно из теоретико-групповых соображений следует, что для неполносимметричных колебаний невозможно смещение положения равновесия [275] и при переходе изменяется только частота моды, в то время как для полносимметричных колебаний определяющим является эффект смещения минимума потенциальной энергии [250].

Интегралы перекрытия (ИП) для двукратно и трехкратно вырожденных мод в случае разрешенного электронного перехода, не нарушающего симметрию молекулы, рассматривались в работах [316, 317]. Некоторые ИП в представлении углового момента вычислялись в [312]. В работе [316] на примере одномерного и двумерного осцилляторов обсуждалось влияние радиального возмущения на матричные элементы перехода. В работах [298, 299] были найдены простые замкнутые выражения для ИП в случае двукратно и трехкратно вырожденных мод, получены полезные для расчетов рекуррентные соотношения и правила сумм. Используя результаты [299], авторы работы [300] проанализировали интенсивности двукратно вырожденной моды в вибронном переходе бензола. В настоящем параграфе излагаются результаты этих работ.

Рассмотрим вначале, следуя [299], случай, когда в результате электронного перехода симметрия молекулы не изменяется. В этом случае колебательное движение ядер, отвечающее вырожденной моде с частотой ω , в гармоническом приближении описы-

вається изотропным осциллятором с гамильтонианом вида

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \sum_{i=1}^N (a_i^\dagger a_i + a_i a_i^\dagger), \quad (11.1)$$

где a_i^\dagger и a_i — обычные операторы рождения и уничтожения, явное выражение которых дается формулой (2.2); ω — частота колебаний.

Так как вибронный переход не изменяет симметрию молекулы, то в возбужденном электронном состоянии изменяется только частота моды. Гамильтониан, описывающий эту вырожденную моду с частотой ω' , имеет вид (11.1) с заменой операторов a_i , a_i^\dagger на b_i , b_i^\dagger , а ω на ω' .

Так как координаты осциллятора (11.1) q преобразуются по неприводимому представлению точечной группы и симметрия молекулы при переходе не нарушается, то входящие в преобразование Душинского (2.4) сдвиги равны нулю (см. [275]). Если операторы a_i подвергнуть ортогональному преобразованию $a_i = o_{ik} a_k$, $o_{ik} o_{kj} = \delta_{ij}$, то, очевидно, гамильтониан (11.1) не изменит свой вид. Следовательно, в вырожденном случае эффект смешивания несуществен, т. е. матрицу $\|S_{ki}\|$, входящую в (2.4), без ограничения общности можно считать единичной. Таким образом, преобразование (2.5) для вырожденной моды принимает вид *)

$$b_i = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{\omega'}{\omega}} + \sqrt{\frac{\omega}{\omega'}} \right) a_i + \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{\omega'}{\omega}} - \sqrt{\frac{\omega}{\omega'}} \right) a_i^\dagger; \quad (11.2)$$

$$b_i^\dagger = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{\omega'}{\omega}} - \sqrt{\frac{\omega}{\omega'}} \right) a_i + \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{\omega'}{\omega}} + \sqrt{\frac{\omega}{\omega'}} \right) a_i^\dagger.$$

Интегралы перекрытия (4.1) для когерентных состояний $|\alpha\rangle$ и $|\gamma\rangle$ начального и конечного осцилляторов факторизуются:

$$\langle \gamma | \alpha \rangle = \prod_{j=1}^N \langle \gamma_j | \alpha_j \rangle, \quad (11.3)$$

где $\langle \gamma_j | \alpha_j \rangle$ — интеграл перекрытия соответствующего одномерного осциллятора. Из (4.1) следует с учетом (11.2), что

$$\begin{aligned} \langle \gamma_j | \alpha_j \rangle &= \frac{2\sqrt{\omega\omega'}}{\omega + \omega'} \exp\left(-\frac{|\alpha_j|^2}{2} - \frac{|\gamma_j|^2}{2}\right) \times \\ &\times \exp\left[\frac{1}{2} \frac{(\omega - \omega')}{(\omega + \omega')} (\alpha_j^2 - \gamma_j^{*2}) + \frac{2\sqrt{\omega\omega'}}{\omega + \omega'} \alpha_j \gamma_j^*\right]. \end{aligned} \quad (11.4)$$

*) Отметим, что преобразование (11.2) было введено Боголюбовым [376, 378] при рассмотрении сверхтекучести слабо неидеального бозе-газа.

Интегралы перекрытия между стационарными состояниями $|v\rangle$ и $|v'\rangle$

$$a_j^\dagger a_j |v\rangle = v_j |v\rangle; \quad b_j^\dagger b_j |v'\rangle = v'_j |v'\rangle \quad (11.5)$$

также факторизуются:

$$\langle v' | v \rangle = \prod_{j=1}^N \langle v'_j | v_j \rangle. \quad (11.6)$$

Факторизация интегралов перекрытия связана с возможностью разделения переменных в декартовых координатах u , следующей из (11.2) в связи с отсутствием смешивания координат. Амплитуда $\langle \gamma_j | \alpha_j \rangle$ служит производящей функцией для амплитуд $\langle v'_j | v_j \rangle$ (см. § 4 гл. III). Разлагая (11.4) в ряд по степеням β_j^* и α_j , получаем для ИП [186]

$$\langle v' | v \rangle = \left(\cos \frac{\theta}{2} \right)^{N/2} \prod_{j=1}^N d_{0, v'_j - v_j}^{(v'_j + v_j)/2}(\cos \theta), \quad (11.7)$$

где $d_{m', m}^j(\cos \theta)$ — функция Вигнера [320], $\cos \theta = 2\sqrt{\omega\omega'}/(\omega + \omega')$.

Отметим, что ИП $\langle v'_j | v_j \rangle$ является, в силу (3.7), матричным элементом линейного канонического преобразования Боголюбова (11.2), матричные элементы которого приведены в [186], где даны ссылки на более ранние работы. Так как $d_{m', m}^j(\cos \theta)$ является матричным элементом неприводимого унитарного представления группы $O(3)$ [320], то из (11.7) следуют правила сумм для факторов Франка — Кондона [299]:

$$\sum_{v_k + v'_k = j_k} \left| \frac{\langle v' | v \rangle}{\langle 0 | 0 \rangle} \right|^2 = 1, \quad (11.8)$$

где суммирование производится вдоль прямых $v_k + v'_k = j_k$, $k = 1, 2, \dots, N$, при фиксированных числах $j_k \geq 0$.

Теперь разберем случай $N = 2$, описывающий двукратно вырожденную моду. Примерами таких мод являются: деформационные колебания линейной многоатомной молекулы типа CO_2 [319]; валентные плоские колебания молекулы типа XY_4 с группой симметрии D_{4h} и др. Если молекула обладает осью симметрии порядка $n \geq 3$, то имеются двукратно вырожденные моды. В случае $N = 2$ ввиду изотропности осциллятора полезно, наряду с квантовыми числами v (11.5), рассмотреть другие квантовые числа v, m , являющиеся собственными значениями оператора энергии и проекции момента $l_3 = p_1 q_2 - p_2 q_1$. Волновые функции состояний $|v, m\rangle$ с определенной энергией и проекцией момента

$$\mathcal{H} |v, m\rangle = \hbar\omega (v + 1) |v, m\rangle; \quad (11.9)$$

$$l_3 |v, m\rangle = \hbar m |v, m\rangle$$

в цилиндрических координатах r, φ ($re^{i\varphi} = q_1 + iq_2$) имеют вид

$$\langle r, \varphi | v, \pm l \rangle \equiv \psi_{v, \pm l}(r, \varphi) = e^{\pm i l \varphi} \psi_{v, l}(r), \quad (11.10)$$

где l — целое неотрицательное число; числа v и l — одинаковой четности: $l = v, v - 2, v - 4, \dots, 1$ или 0 . Приведем явный вид волновой функции [53]:

$$\begin{aligned} \psi_{v l}(r) \equiv \langle r | v, l \rangle &= \left[\frac{2\omega}{\hbar} \left(\frac{v-l}{2} \right)! / \left(\frac{v+l}{2} \right)! \right]^{1/2} \times \\ &\times \left(\frac{\omega}{\hbar} r^2 \right)^{l/2} \exp \left(- \frac{\omega}{2\hbar} r^2 \right) L_{(v-l)/2}^l \left(\frac{\omega}{\hbar} r^2 \right), \end{aligned} \quad (11.11)$$

где $L_n^l(x)$ — присоединенный полином Лагерра [88].

Волновые функции $\psi_{v'l'}(r, \varphi)$, описывающие колебания в возбужденном электронном состоянии, получаются из начальных волновых функций (11.10) с помощью очевидных замен $\omega \rightarrow \omega'$, $v \rightarrow v'$, $l \rightarrow l'$. Для того чтобы вычислить интегралы перекрытия $\langle v', l' | v, l \rangle$ согласно изложенной выше схеме, необходимо построить новые когерентные состояния, которые являлись бы производящими функциями для состояний $|v, l\rangle$.

Образуем сначала из операторов a_i, b_i новые операторы

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1 + ia_2), \quad A_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1 - ia_2); \quad (11.12)$$

$$B_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (b_1 + ib_2), \quad B_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (b_1 - ib_2), \quad (11.13)$$

удовлетворяющие бозевским перестановочным соотношениям

$$[A_i, A_j] = [A_i^\dagger, A_j^\dagger] = 0; \quad [A_i, A_j^\dagger] = \delta_{ij};$$

$$[B_i, B_j] = [B_i^\dagger, B_j^\dagger] = 0; \quad [B_i, B_j^\dagger] = \delta_{ij}.$$

Гамильтониан (11.1) сохраняет свой вид при преобразовании (11.12). Когерентные состояния $|\beta_1, \beta_2\rangle$ являются нормированными собственными векторами операторов уничтожения (11.12):

$$A_i |\beta_1, \beta_2\rangle = \beta_i |\beta_1, \beta_2\rangle; \quad (11.14)$$

$$B_i |\delta_1, \delta_2\rangle = \delta_i |\delta_1, \delta_2\rangle. \quad (11.15)$$

Волновые функции этих состояний получаются из волновых функций $|\alpha_1, \alpha_2\rangle$ (см. § 4) с помощью замен $\alpha_1 = (\beta_1 + i\beta_2)/\sqrt{2}$, $\alpha_2 = (\beta_1 - i\beta_2)/\sqrt{2}$ и в цилиндрических координатах имеют вид [299]

$$\begin{aligned} \langle r, \varphi | \beta_1, \beta_2 \rangle &= \left(\frac{\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \exp \left(- \frac{|\beta_1|^2 + |\beta_2|^2}{2} \right) \times \\ &\times \exp \left[- \frac{\omega r^2}{2\hbar} - \beta_1 \beta_2 + \sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} r (\beta_1 e^{-i\varphi} + \beta_2 e^{i\varphi}) \right]. \end{aligned} \quad (11.16)$$

Когерентное состояние $|\beta_1, \beta_2\rangle$ при повороте в положительном направлении на угол θ в плоскости q_1, q_2 переходит снова

в когерентное:

$$\exp(i\theta l_3) |\beta_1, \beta_2\rangle = |e^{-i\theta}\beta_1, e^{i\theta}\beta_2\rangle. \quad (11.17)$$

Разлагая когерентное состояние $|\beta_1, \beta_2\rangle$ в ряд по степеням β_1, β_2 , находим

$$|\beta_1, \beta_2\rangle = \exp[-(|\beta_1|^2 + |\beta_2|^2)/2] \times \\ \times \sum_{v, l} \left(\frac{v+l}{2}! \frac{v-l}{2}! \right)^{-1/2} \beta_1^{\frac{v-l}{2}} \beta_2^{\frac{v+l}{2}} |v, l\rangle. \quad (11.18)$$

Таким образом, волновая функция когерентного состояния (11.16) служит производящей функцией для волновых функций стационарных состояний (11.9). Интеграл перекрытия $\langle \delta_1, \delta_2 | \beta_1, \beta_2 \rangle$ получается из ИП (11.3) с помощью подстановки

$$\alpha_1 = \frac{\beta_1 + i\beta_2}{\sqrt{2}}, \quad \alpha_2 = \frac{\beta_1 - i\beta_2}{\sqrt{2}}, \\ \delta_1 = \frac{\gamma_1 + i\gamma_2}{\sqrt{2}}, \quad \delta_2 = \frac{\gamma_1 - i\gamma_2}{\sqrt{2}}.$$

Амплитуда $\langle \delta | \beta \rangle$, очевидно, ввиду (11.18) является производящей функцией для ИП $\langle v', l | v, l \rangle$. Разлагая $\langle \delta | \beta \rangle$ в ряд по степеням $\delta_1^*, \delta_2^*, \beta_1, \beta_2$ и используя формулы (4.14), (4.15) гл. II, находим

$$\langle v', l | v, l \rangle = \cos \frac{\theta}{2} d_{(v-v')/4+l/2, (v'-v)/4+l/2}^{(v+v')/4}(\cos \theta), \quad (11.19)$$

где $d_{m, m'}^j$ — d -функция Вигнера [320].

В работах [298, 299] формула (11.19) была выведена другим способом. Так как $d_{m, m'}^j(\cos \theta)$ является матричным элементом унитарного неприводимого представления группы $O(3)$, то из (11.19) можно получить некоторые правила сумм. Если экспериментально не разрешается структура линий, отвечающая определенным m , то представляет интерес величина

$$I_{v'v} = \sum_{m=-[v', v]}^{m=[v', v]} |\langle v', m | v, m \rangle|^2, \quad (11.20)$$

где $[v', v] = \min(v, v')$, определяющая относительную интенсивность полосы. Из (11.19) следует правило сумм, установленное в [299]:

$$\sum_{v+v'=4j} I_{v'v} = (2j+1) \cos^2 \frac{\theta}{2}. \quad (11.21)$$

Перейдем теперь к обсуждению запрещенных электронных переходов, не изменяющих симметрию молекулы. Как уже указывалось выше (в § 8), в кондоновском приближении электронный момент запрещенного электронного перехода равен нулю (см. (8.1)). Вследствие этого обычно, следуя Герцбергу — Теллеру

[275], рассматривают разложение электронного момента перехода в ряд по нормальным координатам колебательных мод (см. (8.2)).

В случае двукратно вырожденной моды в этой связи естественно рассматривать матричные элементы вида $\langle v', m' | r^p e^{iq\varphi} | v, m \rangle$, где p и q — целые числа. Аналогичные амплитуды возникают при учете ангармонизма. При вычислении этих амплитуд интегрирование по углу φ приводит к очевидному правилу отбора $m' - m = q$. Дальнейшее интегрирование по r приводит, как показано в [298, 299], к появлению гипергеометрической функции Аппеля от двух переменных [88, 223]. Приведем явное выражение для амплитуды, полученное в [298, 299]:

$$\begin{aligned} \langle v', l' | r^p | v, l \rangle &= \left(\frac{2\sqrt{\omega\omega'}}{\omega + \omega'} \right)^{(l+l')/2+1} \left(\frac{\omega}{\omega'} \right)^{(l-l')/4} \left(\frac{2\hbar}{\omega + \omega'} \right)^{p/2} \times \\ &\times \frac{\Gamma(1/2(l'+l+p)+1)}{l!l'!} \left[\frac{v+l}{2}! \frac{v'+l'}{2}! \left(\frac{v-l}{2}! \frac{v'-l'}{2}! \right)^{-1} \right] \times \\ &\times F_2 \left(\frac{l+l'+p+2}{2}; \frac{l-v}{2}; \frac{l'-v'}{2}; l+1; l'+1; \frac{2\omega}{\omega + \omega'}; \frac{2\omega'}{\omega + \omega'} \right). \end{aligned} \quad (11.22)$$

Из (11.22) легко следуют ИП $\langle v', l' | v, l \rangle$ для радиальных волновых функций $\psi_{vl}(r)$ (11.14). Отметим, что такие интегралы перекрытия совпадают с ИП для волновых функций ангармонического потенциала типа сингулярного одномерного осциллятора, вычисленных в [302], если отождествить параметр сингулярности a с квантовым числом l . Там же приведены рекуррентные соотношения для ИП, которые целиком переносятся на рассматриваемый случай. Именно:

$$\begin{aligned} \langle v', l' | v+2, l \rangle &= \frac{\omega - \omega'}{\omega + \omega'} \left[\frac{(v-l)(v+l)}{(v-l+2)(v+l+2)} \right]^{1/2} \langle v', l' | v-2, l \rangle + \\ &+ \frac{2\omega}{\omega + \omega'} \left[\frac{(v'-l')(v'+l')}{(v'-l'+2)(v'+l'+2)} \right]^{1/2} \langle v'-2, l' | v, l \rangle + \\ &+ 2 \frac{\omega'(v+1) - \omega(v'+1)}{(\omega + \omega')[(v-l+2)(v+l+2)]^{1/2}} \langle v', l' | v, l \rangle; \end{aligned} \quad (11.23)$$

$$\begin{aligned} \langle v'+2, l' | v, l \rangle &= \frac{\omega - \omega'}{\omega + \omega'} \left[\frac{(v'-l')(v'+l')}{(v'-l'+2)(v'+l'+2)} \right]^{1/2} \times \\ &\times \langle v'-2, l' | v, l \rangle + \frac{2\omega'}{\omega + \omega'} \left[\frac{(v-l)(v+l)}{(v'-l'+2)(v'+l'+2)} \right]^{1/2} \times \\ &\times \langle v', l' | v-2, l \rangle + 2 \frac{\omega(v'+1) - \omega'(v+1)}{(\omega + \omega')[(v'-l'+2)(v'+l'+2)]^{1/2}} \times \\ &\times \langle v', l' | v, l \rangle. \end{aligned} \quad (11.24)$$

Эти рекуррентные соотношения позволяют просто вычислять значения интегралов перекрытия.

Отметим, что интеграл перекрытия $\langle v', l | v, l \rangle$ рассматривался ранее в работах [317] и для него были получены некоторые рекуррентные соотношения, отличающиеся от (11.23), (11.24).

Рекуррентные соотношения для ИП $\langle v', l' | r^p | v, l \rangle$ получаются из соотношений (11.23) и (11.24) путем замены $v' \rightarrow v' + p/2$ в коэффициенте при $\langle v', l' | v, l \rangle$ соотношения (11.23) и замены $v \rightarrow v + p/2$ в коэффициенте при $\langle v', l' | v, l \rangle$ соотношения (11.24).

Обсудим теперь кратко, следуя [299], случай трехкратно вырожденной колебательной моды. Если молекула допускает тетраэдральную или октаэдральную точечную группу симметрии, то у нее имеется трехкратно вырожденная колебательная мода. Колебательное движение ядер, отвечающее этой моде, описывается трехмерным изотропным осциллятором с гамильтонианом (11.1) при $N = 3$.

Волновые функции начального и конечного состояний осцилляторов в декартовых координатах распадаются на произведение одномерных ИП. В силу инвариантности гамильтонианов начального и конечного состояний относительно группы вращений, эффект смешивания мод отсутствует. Это приводит к факторизации ИП в виде произведения трех одномерных ИП (11.6). Факторы Франка — Кондона $|\langle v' | v \rangle|^2$ подчиняются правилам сумм (11.8).

Очевидно, что гамильтониан трехмерного изотропного осциллятора допускает разделение переменных в сферических координатах. Это позволяет представить волновые функции стационарных состояний с энергией $E = \hbar\omega(v + 3/2)$, обладающих определенным моментом, в виде $\langle r | v, l, m \rangle = R_{vl}(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, где $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ — нормированные сферические функции. Как известно [53], радиальная волновая функция имеет вид

$$\begin{aligned} \langle r | v, l \rangle &\equiv R_{vl}(r) = \\ &= \left\{ 2 \left(\frac{\omega}{\hbar} \right)^{3/2} \frac{\Gamma[(v-l+2)/2]}{\Gamma[(v+l+3)/2]} \right\}^{1/2} \left(\frac{\omega r^2}{\hbar} \right)^{l/2} e^{-\omega r^2/2\hbar} L_{(v-l)/2}^{l+1/2} \left(\frac{\omega r^2}{\hbar} \right). \end{aligned} \quad (11.25)$$

Интегралы перекрытия $\langle v', l, m | v, l, m \rangle \equiv \langle v', l | v, l \rangle$, являющиеся, по существу, ИП для радиальных волновых функций (11.11), редуцируются, ввиду (11.25), к аналогичным амплитудам $\langle v', l | v, l \rangle$ (11.19). Приведем окончательный результат [299]:

$$\langle v', l, m | v, l, m \rangle = (\cos \theta)^{3/2} d_{M, M'}^J(\cos \theta), \quad (11.26)$$

где $\cos \theta = 2\sqrt{\omega\omega'}/(\omega + \omega')$; $d_{M, M'}^J$ — d -функция Вигнера [320], $J = (v + v' + 1)/4$, $M = (2l + 1 + v - v')/4$, $M' = (2l + 1 + v' - v)/4$.

Для интегралов перекрытия $\langle v', l | v, l \rangle$ между радиальными волновыми функциями (11.25) в [298, 299] получены рекуррентные соотношения, которые следуют из рекуррентных соотношений (11.23), (11.24) с помощью замен

$$v \rightarrow v + 1/2, \quad v' \rightarrow v' + 1/2, \quad l \rightarrow l + 1/2. \quad (11.27)$$

Квазиклассическая асимптотика ИП $\langle v', l | v, l \rangle$ в случае двукратно и трехкратно вырожденных мод сводится к квазиклассической асимптотике d -функции Вигнера, подробно рассматриваемой в гл. X.

Применим полученные выше результаты для анализа некоторых интенсивностей вибронного перехода бензола $B_{2u} \rightarrow A_{1g}$ в системе 2600 Å. Серия полосы A_0^S (обозначения по Ингольду [308]) отвечает переходам с возбуждением в обоих состояниях вырожденных колебаний типа $E_u^+(C)$, т. е. переходов вида

$$0_{A_{1g}} 1_{E_g^+(C)} S_{E_u^+(C)} - 0_{A_{1g}} 0_{E_g^+(C)} S_{E_u^+(C)}$$

В рамках гармонического приближения эти переходы моделируются двумерным изотропным гармоническим осциллятором. Интегралы перекрытия для волновых функций, описывающих дважды вырожденные колебания, даются формулой (11.19). Фактор Франка — Кондона равен квадрату интеграла перекрытия, умноженному на статистический вес $\varepsilon(l)$, который равен 1 для $l = 0$ и 2 для $l \neq 0$. Таким образом, относительная интенсивность полосы A_0^S задается, с учетом больцмановского фактора, выражением [300]

$$I(S)/I(0) = e^{-\hbar\omega/kT} W(S), \quad (11.28)$$

где $W(S) = \sum_l |d_{l/2, l/2}^{S/2}(\theta)|^2 \varepsilon(l)$. Суммирование здесь ведется по всем l , допустимым для данного S . Приведем значения нескольких первых выражений $W(S)$:

S	$W(S), \quad y = \cos^2(\theta/2)$
1	y
2	$2y^2 + (2y - 1)^2$
3	$2[y^3 - (3y - 2)^2]$
4	$2y^4 + 2(4y - 3)^2 y^2 + (6y^2 - 6y + 1)^2$
5	$2[y^5 + y^3(5y - 4)^2 + y(y^2 - 12y + 3)]$

Здесь каждый отдельный член в сумме представляет собой вклад определенного значения l со своим статистическим весом.

Предполагается, что при электронном переходе не изменяется точечная группа симметрии равновесной конфигурации молекулы и, следовательно, для вычисления интенсивностей переходов можно использовать формулу (11.19). Кроме того, колебание $E_u^+(C)$ не смешивается при возбуждении с другим колебанием той же симметрии.

Частоты ω и ω' равны соответственно 405 и 243 см^{-1} [308]. Больцмановский фактор при $T = 300$ К равен 0,135. Подставляя

Интенсивность полос A_0^S

S	Эксперимент [308]	Теория
0	1,000	1,000
1	0,253	0,254
2	0,081	0,047
3	0,0104	0,075

эти величины в (11.28), находим значения интенсивностей полос A_0^S . Результаты приведены в табл. 11.

§ 12. Электронный переход, вызывающий нарушение симметрии молекулы

В настоящем параграфе изложенная выше общая схема расчета факторов Франка — Кондона применяется для рассмотрения вибронного перехода, при котором молекула в основном и возбужденном электронных состояниях обладает различной точечной группой симметрии.

В качестве простейшего примера такого перехода рассмотрим, следуя [298, 299], случай, когда при вибронном переходе число колебательных степеней свободы сохраняется. Например, молекула в основном электронном состоянии имеет двукратно вырожденную моду колебаний с частотой ω , а в возбужденном электронном состоянии это вырождение частот оказывается снятым.

Вырожденные колебания в основном электронном состоянии молекулы описываются двумерным изотропным осциллятором, гамильтониан которого \mathcal{H}_{in} имеет вид (11.1) с $N = 2$. Этот гамильтониан не изменяется при повороте в плоскости нормальных координат q_1, q_2 .

В возбужденном электронном состоянии колебания молекулы описываются гамильтонианом $\mathcal{H}_f = p^2/2 + U_f(q_1, q_2)$. Потенциальная энергия колебаний в возбужденном состоянии является неоднородной положительно определенной квадратичной формой

$$\begin{aligned}
 U_f(q_1, q_2) &\equiv \frac{1}{2} \mathbf{q} u_f \mathbf{q} + (\mathbf{f}, \mathbf{q}) = \\
 &= u_{11} q_1^2 + 2u_{12} q_1 q_2 + u_{22} q_2^2 + f_1 q_1 + f_2 q_2, \quad (12.1)
 \end{aligned}$$

причем $u_{11}u_{22} - u_{12}^2 > 0$, $u_{ii} > 0$. Упростим теперь гамильтониан \mathcal{H}_f , приведя квадратичную форму u_f к диагональному виду некоторым ортогональным преобразованием S . Существенно, что при таком преобразовании не изменяется гамильтониан \mathcal{H}_{in} .

В новых координатах $\mathbf{y} = S\mathbf{q}$ потенциальная энергия имеет вид

$$U_f = 1/2 (\omega_1'^2 y_1^2 + \omega_2'^2 y_2^2) + c_1 y_1 + c_2 y_2,$$

где $\mathbf{c} = S\mathbf{f}$, $S = \begin{pmatrix} \cos \chi & \sin \chi \\ -\sin \chi & \cos \chi \end{pmatrix}$. Очевидно, что y_1, y_2 являются нормальными координатами, а ω_1' и ω_2' — частотами этих колебаний. Угол поворота χ определяется коэффициентами квадратичной формы

$$\cos \chi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 + \frac{u_{11} - u_{22}}{\sqrt{(u_{11} - u_{22})^2 + u_{12}^2}} \right]^{1/2}.$$

В переменных \mathbf{y} волновые функции когерентного состояния $|\gamma_1, \gamma_2\rangle_f$ конечного осциллятора имеют вид

$$\begin{aligned} |\gamma_1, \gamma_2\rangle_f = & \left(\frac{\omega_1' \omega_2'}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{1/4} \exp \left\{ -\frac{\omega_1'}{2\hbar} (y_1 + \Delta_1)^2 - \frac{\omega_2'}{2\hbar} (y_2 + \Delta_2)^2 - \right. \\ & - \frac{1}{2} [(\gamma_1^*)^2 + (\gamma_2^*)^2 + |\gamma_1|^2 + |\gamma_2|^2] - \sqrt{\frac{2\omega_1'}{\hbar}} \gamma_1 (y_1 + \Delta_1) - \\ & \left. - \sqrt{\frac{2\omega_2'}{\hbar}} \gamma_2 (y_2 + \Delta_2) \right\}, \quad (12.2) \end{aligned}$$

где $\Delta_1 = c_1 / (\omega_1')^2$, $\Delta_2 = c_2 / (\omega_2')^2$. Волновые функции когерентного состояния $|\alpha_1, \alpha_2\rangle_{in}$ начального осциллятора получаются из (12.2) с помощью очевидных замен $\gamma_i \rightarrow \alpha_i$; $\omega_i' \rightarrow \omega$; $\Delta_i = 0$. Волновые функции (12.2) являются, так же, как и волновые функции стационарных состояний, произведением двух волновых функций одномерных осцилляторов. Следовательно, интегралы перекрытия (ИП) факторизуются:

$$\begin{aligned} \langle \gamma_1, \gamma_2 | \alpha_1, \alpha_2 \rangle &= \langle \gamma_1 | \alpha_1 \rangle \langle \gamma_2 | \alpha_2 \rangle; \\ \langle v_1', v_2' | v_1, v_2 \rangle &= \langle v_1' | v_1 \rangle \langle v_2' | v_2 \rangle. \end{aligned}$$

Амплитуды перехода $\langle \gamma_i | \alpha_i \rangle$ являются гауссовыми интегралами перекрытия типа (4.1) и легко вычисляются:

$$\begin{aligned} \langle \gamma_i | \alpha_i \rangle = & \left(\frac{2\sqrt{\omega\omega_i'}}{\omega + \omega_i'} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{\omega\omega_i'}{\omega + \omega_i'} \Delta_i^2 \right) \times \\ & \times \exp \left[-\frac{1}{2} (|\alpha_i|^2 + |\gamma_i|^2) + \frac{1}{2} \frac{\omega - \omega_i'}{\omega + \omega_i'} (\alpha_i^2 - \gamma_i^{*2}) + \frac{2\sqrt{\omega\omega_i'}}{\omega + \omega_i'} \times \right. \\ & \left. \times \left(\alpha_i \gamma_i^* + \frac{\sqrt{\omega}\gamma_i^* \Delta_i}{\sqrt{2}} - \frac{\sqrt{\omega_i'} \alpha_i \Delta_i}{\sqrt{2}} \right) \right]. \quad (12.3) \end{aligned}$$

Так как амплитуда $\langle \gamma_i | \alpha_i \rangle$ является производящей функцией для амплитуд $\langle v_i' | v_i \rangle$, то, разлагая $\langle \gamma_i | \alpha_i \rangle$ в ряд по степеням

α_i и γ_i^* в соответствии с (5.4), находим [299]

$$\langle v'_1, v'_2 | v_1, v_2 \rangle = 2 \left[\frac{\omega \sqrt{\omega'_1 \omega'_2}}{(\omega + \omega'_1)(\omega + \omega'_2)} \right]^{1/2} \times \\ \times \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\omega \omega'_1}{\omega + \omega'_1} \Delta_1^2 + \frac{\omega \omega'_2}{\omega + \omega'_2} \Delta_2^2 \right) \right] \times \\ \times H_{v'_1, v'_1}(z_1, z'_1) H_{v'_2, v'_2}(z_2, z'_2), \quad (12.4)$$

где

$$z_i = -\frac{\sqrt{2\omega} \omega'_i}{\omega + \omega'_i} \Delta_i, \quad z'_i = \frac{\sqrt{2\omega'_i} \omega}{\omega + \omega'_i} \Delta_i \quad (i = 1, 2)$$

и функции $H_{v'_i, v'_i}(z_i, z'_i)$ являются полиномами Эрмита от двух переменных [88, 223]. Из (12.4) находим парциальную интенсивность $0 \rightarrow 0$ -перехода аналогично соотношению (6.7)

$$\frac{|\langle 0, 0 | 0, 0 \rangle|^2}{\sum |\langle 0, 0 | v_1, v_2 \rangle|^2} = \frac{|\langle 0, 0 | 0, 0 \rangle|^2}{\sum |\langle v'_1, v'_2 | 0, 0 \rangle|^2} = \\ = \frac{4\omega \sqrt{\omega'_1 \omega'_2}}{(\omega + \omega'_1)(\omega + \omega'_2)} \exp \left(-\frac{\omega \omega'_1}{\omega + \omega'_1} \Delta_1^2 - \frac{\omega \omega'_2}{\omega + \omega'_2} \Delta_2^2 \right). \quad (12.5)$$

Если в результате электронного перехода происходит только изменение частот, а минимум потенциальной энергии $U_f(q_1, q_2)$ не смещается, т. е. $\Delta_i = 0$, то интеграл перекрытия значительно упрощается. Получаем

$$\langle v'_1, v'_2 | v_1, v_2 \rangle = \left(\cos \frac{\theta_1}{2} \cos \frac{\theta_2}{2} \right)^{1/2} d_{0, (v'_1 - v_2)/2}^{(v_1 + v_2)/2}(\theta_1) d_{0, (v'_2 - v_2)/2}^{(v_2 + v'_2)/2}(\theta_2),$$

где $\cos(\theta_1/2) = 2\sqrt{\omega \omega'_1}/(\omega + \omega'_1)$, $\cos(\theta_2/2) = 2\sqrt{\omega \omega'_2}/(\omega + \omega'_2)$. Из этих выражений получаем дополнительное правило сумм

$$\sum_{v_1 + v'_1 = 2j_1} \sum_{v_2 + v'_2 = 2j_2} \left| \frac{\langle v'_1, v'_2 | v_1, v_2 \rangle}{\langle 0, 0 | 0, 0 \rangle} \right|^2 = 1.$$

Правило сумм (12.5) переходит теперь при $\Delta_i = 0$ в произведение двух величин $2\sqrt{\omega \omega'_1}/(\omega + \omega'_1)$ и $2\sqrt{\omega \omega'_2}/(\omega + \omega'_2)$ в соответствии с известной формулой Герцберга — Теллера (см. [256], (II, 29), стр. 150).

Наряду с колебательными числами v_1, v_2 , начальное состояние можно характеризовать другими квантовыми числами: проекцией момента l и радиальным колебательным числом v . Волновые функции состояний $|v, l\rangle$ приведены в § 11 (см. (11.11)). Прежде чем находить интегралы перекрытия $\langle v'_1, v'_2 | v, l \rangle$, полезно вычислить амплитуду $\langle \gamma_1, \gamma_2 | v, l \rangle$, являющуюся производящей функцией для $\langle v'_1, v'_2 | v, l \rangle$,

Для нахождения $\langle v'_1, v'_2 | v, l \rangle$ используем метод, развитый в § 11. В амплитуде $\langle \gamma_1, \gamma_2 | \alpha_1, \alpha_2 \rangle$ величины α_i положим равными, в соответствии с (11.6), $\alpha_1 = (\beta_1 + i\beta_2) / \sqrt{2}$, $\alpha_2 = (\beta_1 - i\beta_2) / \sqrt{2}$ и получим амплитуду $\langle \gamma_1, \gamma_2 | \beta_1, \beta_2 \rangle$. Разлагая $\langle \gamma_1, \gamma_2 | \beta_1, \beta_2 \rangle$, являющуюся производящей функцией для $\langle \gamma_1, \gamma_2 | v, l \rangle$, в ряд по степеням β_1, β_2 , получаем [299]

$$\begin{aligned} \langle \gamma_1, \gamma_2 | v, l \rangle = \langle 0, 0 | 0, 0 \rangle & \left[\frac{\left(\frac{v-l}{2}\right)!}{\left(\frac{v+l}{2}\right)!} \right]^{1/2} H_{\frac{v+l}{2}, \frac{v-l}{2}}(z_1, z_2) \times \\ & \times \exp \left[\frac{1}{2} \frac{\omega'_1 - \omega}{\omega + \omega'_1} \gamma_1^{*2} + \frac{1}{2} \frac{\omega'_2 - \omega}{\omega + \omega'_2} \gamma_2^{*2} + \frac{\sqrt{2}\omega}{\omega + \omega'_1} \gamma_1^* \delta_1 + \right. \\ & \left. + \frac{\sqrt{2}\omega}{\omega + \omega'_2} \gamma_2^* \delta_2 - \frac{1}{2} (|\gamma_1|^2 + |\gamma_2|^2) \right], \quad (12.6) \end{aligned}$$

где

$$\delta_i = \sqrt{\omega'_i} \Delta_i;$$

$$z_1 = \frac{\sqrt{2\omega\omega'_1}}{\omega - \omega'_1} \left(\frac{\delta_1}{\sqrt{2}} - \gamma_1^* \right) + i \frac{\sqrt{2\omega\omega'_2}}{\omega - \omega'_2} \left(\frac{\delta_2}{\sqrt{2}} - \gamma_2^* \right);$$

$$z_2 = \frac{\sqrt{2\omega\omega'_2}}{\omega - \omega'_2} \left(\frac{\delta_1}{\sqrt{2}} - \gamma_1^* \right) - i \frac{\sqrt{2\omega\omega'_1}}{\omega - \omega'_1} \left(\frac{\delta_2}{\sqrt{2}} - \gamma_2^* \right).$$

Интегралы перекрытия $\langle v'_1, v'_2 | v, l \rangle$ находим, разлагая производящую функцию $\langle \gamma_1, \gamma_2 | \beta_1, \beta_2 \rangle$ в ряд по степеням $\gamma_1^*, \gamma_2^*, \beta_1, \beta_2$. Окончательно получаем

$$\begin{aligned} \langle v'_1, v'_2 | v, l \rangle = \langle 0, 0 | 0, 0 \rangle & \left[\frac{\left(\frac{v+l}{2}\right)! v'_1! v'_2!}{\left(\frac{v-l}{2}\right)!} \right]^{-1/2} \times \\ & \times H_{\frac{v+l}{2}, \frac{v-l}{2}, v'_1, v'_2}(z_1 z_2 z_3 z_4), \quad (12.7) \end{aligned}$$

где

$$z_1 = -\frac{\sqrt{\omega\omega'_1}}{\omega + \omega'_1} \delta_1 - i \frac{\sqrt{\omega\omega'_2}}{\omega + \omega'_2} \delta_2;$$

$$z_2 = -\frac{\sqrt{\omega\omega'_2}}{\omega + \omega'_2} \delta_2 + i \frac{\sqrt{\omega\omega'_1}}{\omega + \omega'_1} \delta_1;$$

$$z_3 = \frac{\sqrt{2}\omega}{\omega + \omega'_1} \delta_1; \quad z_4 = \frac{\sqrt{2}\omega}{\omega + \omega'_2} \delta_2$$

и $H_{n_1 n_2 n_3 n_4}(z_1 z_2 z_3 z_4)$ — полином Эрмита от четырех переменных [88]. Формула (12.7) находится в полном соответствии с общим результатом (4.3),

Симметрии релятивистских волновых уравнений и уравнений с внутренними переменными

§ 1. Динамическая симметрия релятивистского волчка

В предыдущих главах мы показали, что нерелятивистские квантовомеханические системы, такие, как осциллятор, ротатор, атом водорода, обладают динамическими симметриями, которые позволяют описывать поведение системы полностью в рамках одного неприводимого представления группы симметрии. В настоящей главе будут рассмотрены некоторые простые релятивистские волновые уравнения и уравнения теории поля, причем мы покажем, как метод динамических симметрий, использованный в том же аспекте, что и в предыдущих параграфах, описывает эти волновые уравнения.

Рассмотрим в настоящем параграфе некоторое модельное релятивистское уравнение со спектром масс.

Одним из основных инструментов для описания поведения квантовых систем, будь то атомы, молекулы, ядра атомов или элементарные частицы, являются волновые уравнения. Волновые уравнения можно рассматривать как с учетом специальной теории относительности Эйнштейна, — это релятивистские волновые уравнения, подходящие для описания квантовых объектов, обладающих скоростями, приближающимися к скорости света, — так и нерелятивистские волновые уравнения, например уравнение Шредингера и уравнение Паули, описывающее частицу со спином $1/2$. Что касается релятивистских волновых уравнений, предназначенных в первую очередь для описания элементарных частиц, то их можно разделить, хотя и несколько условно, на три типа. Во-первых, это уравнения для волновой функции, имеющей конечное число компонент и описывающей объект с конечным спином. Первое релятивистское волновое уравнение для частицы со спином $1/2$ было написано в 1928 г. Дираком [321]. Во-вторых, это уравнения типа написанного в 1932 г. Майорана [322] для волновых функций с бесконечным числом компонент. К третьему типу релятивистских уравнений, описывающих объекты с бесконечным числом спиновых состояний, можно отнести уравнения с непрерывными «внутренними» переменными. Впервые такое уравнение, основанное на модели релятивистского волчка, было предложено в 1947 г. Гинзбургом и Таммом [323].

Ниже мы остановимся на последних двух типах уравнений, являющихся основной темой настоящей главы.

Построение релятивистских уравнений тесно связано с теорией представлений групп Ли, особенно с теорией неприводимых представлений группы Лоренца и группы Пуанкаре.

Обзор теории релятивистских уравнений с внутренними переменными был дан в работе Гинзбурга [324] (см. также [325]). После того как на ускорителях было открыто в шестидесятые годы большое число новых элементарных частиц — резонансов, спектр масс которых находится в настоящее время примерно в интервале от одной до пяти протонных масс, а спины имеют большие значения, до $s \sim 10$ (см. таблицы Розенфельда), опять возродился усиленный интерес к релятивистским уравнениям со спектром масс и высшими спинами, особенно в связи с успехами применения в теории этих уравнений идей и методов динамических симметрий. Особенно большое количество работ на эту тему стало появляться после важной статьи Намбу [327]. Причем в последнее время разрабатывается как подход, основанный на введении внутренних переменных, так и подход, основанный на приписывании волновой функции индекса, пробегающего бесконечный набор значений, определяемый групповыми свойствами, которые постулируются для волновой функции. В этой связи представляет интерес изучить все аспекты теории бесконечнокомпонентных уравнений со спектром масс, в частности динамические симметрии этих уравнений, в рамках развитого в предыдущих параграфах подхода.

Перейдем теперь к рассмотрению релятивистского уравнения Гинзбурга — Тамма, следуя работам [323 — 325].

Как уже отмечалось, Гинзбург и Тамм предложили ввести новые внутренние непрерывные переменные, например 4-вектор u_μ . Волновая функция Ψ становится при этом зависящей от координат центра масс частицы x_μ и от внутренних переменных u_μ . Можно считать, что 4-вектор u_μ является 4-вектором относительного движения какой-то структурной составляющей элементарной частицы около ее центра масс. Исходя из этих соображений, рассмотрим генераторы группы Лоренца $M_{\mu\nu}$. Эти генераторы являются обобщением на случай четырехмерного пространства генераторов поворота в обычном трехмерном пространстве x_i , которые можно реализовать известным образом:

$$L_{ik} = -i \left(x_i \frac{\partial}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial}{\partial x_i} \right) \quad (i, k = 1, 2, 3). \quad (1.1)$$

Если построить квантовомеханический гамильтониан ротатора, то он будет иметь вид

$$\mathcal{H} = (2J)^{-1} L_{ik} L_{ik}. \quad (1.2)$$

Антисимметричная матрица L_{ik} выражается через оператор углового момента следующим образом:

$$L_{ik} = \begin{vmatrix} 0 & L_z & -L_y \\ -L_z & 0 & -L_x \\ L_y & L_x & 0 \end{vmatrix}. \quad (1.3)$$

Величина J связана с моментом инерции волчка. Гинзбург и Тамм предложили следующее обобщение описанного трехмерного волчка. Пусть генераторы группы Лоренца $M_{\mu\nu}$ задаются формулами

$$M_{\mu\nu} = -i \left(u_\mu \frac{\partial}{\partial u_\nu} - u_\nu \frac{\partial}{\partial u_\mu} \right) \quad (\mu, \nu = 0, 1, 2, 3), \quad (1.4)$$

т. е. являются генераторами поворотов четырехмерного пространства. Тогда величина

$$m \left(u_\mu; \frac{\partial}{\partial u_\mu} \right) = M_{\mu\nu} M_{\mu\nu} \quad (1.5)$$

является инвариантом и очевидным образом обобщает гамильтониан нерелятивистского волчка (1.2) на релятивистский случай. Теперь можно обобщить уравнение Дирака или Клейна — Гордона, считая волновую функцию зависящей от координат «центра масс» системы x_μ и внутренней переменной u_μ . Таким образом, получаем уравнение Гинзбурга — Тамма:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x_\mu \partial x_\mu} - m^2 + \frac{\beta}{2} M_{\mu\nu} M_{\mu\nu} \right] \Psi(x_\mu, u_\nu) = 0. \quad (1.6)$$

Константа β аналогична моменту инерции J в формуле (1.2), а величина m^2 — постоянная. Чтобы решить уравнение (1.6), заметим, что переменные u_μ и x_μ в этом случае разделяются, а волновая функция Ψ может быть факторизована:

$$\Psi(x_\mu, u_\mu) = \Psi(x_\mu) \Phi(u_\mu). \quad (1.7)$$

При этом функция $\Phi(u_\mu)$ является собственной для оператора L_1

$$L_1 = M_{\mu\nu} M_{\mu\nu} / 2; \quad L_1 \Phi = \lambda_1 \Phi. \quad (1.8)$$

Тогда для функции $\Psi(x_\mu)$ имеем соотношение

$$(\square - m^2 + \lambda_1 \beta) \Psi(x_\mu) = 0. \quad (1.9)$$

Как обычно, состояние с определенной массой отождествляется с решением этого уравнения следующего вида:

$$\Psi(x_\mu) = C \exp(-im_0 t). \quad (1.10)$$

Это означает переход в систему покоя ($p = 0$), и мы имеем соотношение для массы частицы

$$m_0^2 = m^2 - \lambda_1 \beta. \quad (1.11)$$

Таким образом, спектр масс, описываемый уравнением Гинзбурга — Тамма, задается собственным значением инвариантного оператора L_1 . В работе Гинзбурга и Тамма [323] четырехвектор u_μ выбирался пространственноподобным. Этот выбор обуславливался желанием иметь дискретный спектр значений λ_1 , а тем самым и дискретный спектр масс (1.11). Легко показать, переходя к сферическим координатам на однополостном гиперболоиде

$$\begin{aligned} u_0 &= r \operatorname{sh} \chi; & u_2 &= r \operatorname{ch} \chi \sin \theta \sin \varphi; \\ u_1 &= r \operatorname{ch} \chi \sin \theta \cos \varphi; & u_3 &= r \operatorname{ch} \chi \cos \theta, \end{aligned} \quad (1.12)$$

что оператор L_1 задается в дифференциальной форме следующим выражением:

$$L_1 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^3 \frac{\partial}{\partial r} \right) - L - \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 - 2r \frac{\partial}{\partial r}. \quad (1.13)$$

Здесь оператор L имеет вид

$$L = \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \chi} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\operatorname{ch}^2 \chi \frac{\partial}{\partial \chi} \right) + \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \chi} \Delta_{\theta, \varphi}, \quad (1.14)$$

где $\Delta_{\theta, \varphi}$ — угловая часть трехмерного оператора Лапласа — равна

$$\Delta_{\theta, \varphi} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (1.15)$$

Если искать только те решения уравнения на собственные значения (1.8), которые обладают конечной нормой, т. е. квадратичноинтегрируемые на однополостном гиперболоиде, то получится дискретный спектр λ_1 . Действительно, переменные χ , θ и φ разделяются, т. е. функцию Φ можно факторизовать:

$$\Phi(\chi, \theta, \varphi) = Y_{l, m}(\theta, \varphi) R(\chi). \quad (1.16)$$

Здесь $Y_{l, m}(\theta, \varphi)$ — обычные сферические функции, а $R(\chi)$ удовлетворяют уравнению

$$\left[\frac{1}{\operatorname{ch}^2 \chi} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\operatorname{ch}^2 \chi \frac{\partial}{\partial \chi} \right) + \frac{l(l+1)}{\operatorname{ch}^2 \chi} + \lambda \right] R(\chi) = 0. \quad (1.17)$$

Нормированным решением этого уравнения являются полиномы Лежандра $P_l^j(\operatorname{th} \chi)$. Здесь j — целое число. Действительно, введем новую переменную и новую функцию:

$$z = \operatorname{th} \chi; \quad P = \sqrt{1 - z^2} R. \quad (1.18)$$

Тогда уравнение (1.17) переписется в следующем виде:

$$(1 - z^2) \frac{d^2 P}{dz^2} - 2z \frac{dP}{dz} + l(l+1)P + \frac{1 + \lambda}{1 - \lambda} P = 0. \quad (1.19)$$

Это стандартное уравнение для функции Лежандра [328]. Оно имеет в качестве нормируемых решений полиномы Лежандра $P_l^j(z)$. Здесь l и j — целые числа. Полиномы нормированы следующим образом:

этим образом [328]:

$$\int_{-1}^1 |P_l^j(z)|^2 dz = \frac{2}{2l+1} \frac{(j+l)!}{(l-j)!}. \quad (1.20)$$

Собственное значение λ дискретно и связано с числом j :

$$\lambda = -j^2 + 1, \quad j = 1, 2, 3, \dots \quad (1.21)$$

При этом число l пробегает значения

$$l = j, j+1, j+2, \dots \quad (1.22)$$

Если же взять времениподобный вектор u_μ , то, как показано в работе [323], у уравнения на собственные значения массы не будет нормируемых решений и будет только непрерывный спектр масс. В работе [329] уточняется данное рассмотрение и учитывается также непрерывный кусок спектра оператора L_1 . Дело в том, что этот оператор подобен гамильтониану атома водорода, обладающего как непрерывным, так и дискретным спектром энергий. Собственные функции дискретного спектра нормируемы, собственные функции непрерывного спектра ненормируемы. Но, если ставить задачу таким образом, чтобы работать в гильбертовом пространстве квадратично-интегрируемых на однополостном гиперboloиде функций, нужно учитывать весь спектр, как дискретный, так и непрерывный его куски, чтобы иметь полную в этом пространстве систему функций. Безусловно, можно выбрать из этого пространства подпространство, в котором будет полной система функций, принадлежащих только дискретному спектру. Особенно ясен результат, полученный Гинзбургом и Таммом [323], на групповом языке. Дело в том, что массовый оператор L_1 , по существу, является оператором Казимира C_1 (см. [330]), что отмечалось и в [323]. Второй оператор Казимира C_2 для данной реализации представления группы Лоренца равен нулю. Спектр операторов Казимира для неприводимых представлений группы Лоренца хорошо известен (см., например, [326, 50], а также [332, 333]):

$$C_1 = -(j-1) + \alpha^2; \quad C_2 = -\alpha j. \quad (1.23)$$

Здесь j — целое или полуцелое, α — положительное действительное число. В реализации (1.6) на однополостном гиперboloиде, если требовать квадратичной интегрируемости собственных функций оператора C_1 , число $\alpha = 0$, j — целое число. Это показано в [323]. Можно этот результат сформулировать и по-другому. Поскольку вектор u_μ пространственноподобен, то задача о собственных значениях оператора Казимира C_1 эквивалентна задаче о построении полной системы функций на однополостном гиперboloиде, т. е. на однородном многообразии, задаваемом стационарной группой вектора $(0, 1, 0, 0)$. Это та же задача, что и о раз-

ложении квазирегулярного представления на однородном многообразии на неприводимые составляющие. В случае двухполостного гиперboloида (времениподобный вектор u_μ , стационарная подгруппа вектора $(1, 0, 0, 0)$) она была решена в [326]. Для однополостного гиперboloида решение дано в [334] и подробное применение к рассматриваемой задаче дано в [329].

Обсудим теперь полученный спектр масс. Как видно из формул (1.11), (1.23), квадрат массы дискретен и каждое значение бесконечнократно вырождено по числу l и проекции момента на ось z (l_z). Масса состояния зависит только от числа j . Теперь перейдем к вопросу об описании полученного спектра масс на основе представления более широкой некомпактной группы. Здесь имеется ряд возможностей. Можно пытаться вкладывать группу Лоренца в более широкие группы; например, группа Лоренца $O(3,1)$ может быть вложена в группу де Ситтера $O(3,2)$, а затем в группу $O(4,2)$, описывающую динамическую симметрию атома водорода. Для того чтобы реализовать это вложение, к генераторам группы Лоренца $M_{\mu\nu}(1,4)$ можно добавить дополнительные генераторы (см. § 6 гл. I), описывающие вращение в шестимерном пространстве. Тогда реализованное на полиномах на четырехмерной сфере представление группы $O(4,2)$ можно рассматривать как приводимое представление группы Лоренца $O(3,1)$. Можно поступить по-другому, добавив к операторам $a_\mu^\dagger a_\nu - a_\nu^\dagger a_\mu = M_{\mu\nu}$, где $a_\mu = (u_\mu + \partial / \partial u_\mu) / \sqrt{2}$, дополнительные операторы $a_\mu^\dagger a^\nu + a_\nu^\dagger a_\mu$. Вместе с предыдущими операторами мы получим алгебру Ли группы $U(3,1)$. Эта алгебра Ли может быть включена в алгебру Ли группы $U(3,2)$. Таким образом, эти группы можно связать со спектром масс релятивистского волчка, полученным на основе релятивистского уравнения Гинзбурга — Тамма.

§ 2. Релятивистские осцилляторные модели

Рассмотрим в данном параграфе динамические симметрии релятивистских волновых уравнений, основанных на осцилляторных моделях. В последние годы такие модели интенсивно используются для описания свойств элементарных частиц (см. работы [335, 336, 51] и обзоры [325, 337]). Нерелятивистский случай обсужден в [338].

Ниже для частиц с полуцелым спином будут рассматриваться уравнения типа (см. [51, 325])

$$\left[\gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \kappa + L(u_{\mu\nu}, \dots) \right] \Psi = 0, \quad (2.1)$$

где $\Psi(x_\mu, u_{\mu\nu}, \dots)$ является биспинором, на который действуют дираковские матрицы γ_μ .

В случае частиц с целым спином мы будем использовать волновую функцию $\Psi_j(x_\mu, u_{\mu\nu}, \dots)$, являющуюся 4-вектором (индекс j)

и подчиняющуюся уравнению

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x_\mu \partial x_\mu} - \kappa^2 - L(u_{\mu\nu}, \dots) \right] \Psi_j = 0. \quad (2.2)$$

В качестве переменных $u_{\mu\nu}$ выберем совокупность 4-векторов u_μ^α , где индекс α отвечает номеру осциллятора и не имеет ничего общего с векторным индексом μ . Оператор L в (2.1) и (2.2) выбирается в виде

$$L = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N b_\alpha \left(-\frac{\partial^2}{\partial u_\mu^\alpha \partial u_\mu^\alpha} + u_\mu^\alpha u_\mu^\alpha \right), \quad (2.3)$$

где, как и везде в других местах, подразумевается суммирование по векторному индексу $\mu = 1, 2, 3, 4$. Использование выражения осцилляторного типа для L диктуется связью с унитарной группой $SU(3)$.

В уравнениях (2.1) и (2.2) переменные разделяются, и, таким образом, их решения можно записать в виде

$$\Psi = \Psi(x_\mu) \varphi(u_\mu^\alpha); \quad \Psi_j = \Psi_j(x_\mu) \varphi(u_\mu^\alpha), \quad (2.4)$$

где под $\varphi(u_\mu^\alpha)$ понимается произведение $\prod_{\alpha, \mu} \varphi(u_\mu^\alpha)$.

Поскольку координаты $u_4^\alpha = iu_0^\alpha$ являются мнимыми, спектр оператора L бесконечно вырожден [51]. В этой связи достаточно использовать дополнительное условие на биспинор Ψ или вектор Ψ_j [339]:

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} \left(u_\mu^\alpha - \frac{\partial}{\partial u_\mu^\alpha} \right) \Psi = 0; \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} \left(u_\mu^\alpha - \frac{\partial}{\partial u_\mu^\alpha} \right) \Psi_j = 0, \quad (2.6)$$

положив в (2.4) $\Psi(x_\mu) = A \exp[-i(Et - \mathbf{p}\mathbf{r})]$; $r = (x_1, x_2, x_3)$; $x_4 = it$, $\hbar = c = 1$. Тогда в системе покоя (при $p = 0$; при этом считаем, что $E \neq 0$) уравнения для $\varphi(u_\mu^\alpha)$ принимают вид

$$(L - \lambda) \varphi(u_\mu^\alpha) = 0; \quad \left(u_4^\alpha - \frac{\partial}{\partial u_4^\alpha} \right) \varphi(u_4^\alpha) = 0, \quad (2.7)$$

где в случае уравнения (2.1) $E^2 = (\kappa + \lambda)^2$, а для уравнения (2.2) $E^2 = \kappa^2 + \lambda$. Собственные значения для масс покоя $|E| = M$ соответственно таковы:

$$M_b = \kappa + \sum_{\alpha=1}^N \omega_{\alpha b} (n_1^\alpha + n_2^\alpha + n_3^\alpha + 1); \quad (2.8)$$

$$M_m^2 = \kappa^2 + \sum_{\alpha=1}^N \omega_{\alpha m}^2 (n_1^\alpha + n_2^\alpha + n_3^\alpha + 1). \quad (2.9)$$

Здесь $n_{1,2,3} = 0, 1, 2, \dots$, коэффициенты b_α (2.3) обозначены через $\omega_{\alpha b}$ (барионы) и $\omega_{\alpha m}^2$ (мезоны), поскольку размерность b_α в обоих случаях, конечно, различна. Роль условий (2.5), (2.6) состоит в том, что они приводят к необходимости полагать $n_4^\alpha = 0$ (это, разумеется, уже учтено в (2.8), (2.9)).

Легко видеть, что собственные функции системы (2.7) реализуют неприводимые представления группы $U(3N)$, задаваемые старшим весом $(N, 0, \dots, 0)$, где число нулей равно $3N - 1$. В этой связи сразу же ясно, что использовать один осциллятор ($N = 1$) мы не можем — этому случаю отвечают старшие веса $(N, 0, 0)$; в то же время октету соответствует старший вес $(2, 1, 0)$. Для двух осцилляторов ($N = 2$) уже можно построить все необходимые унитарные мультиплеты [51, 325]. Однако оператор момента количества движения оказывается не коммутирующим с генераторами T_3 и Y группы $SU(3)$. Поэтому, очевидно, нельзя построить функции, являющиеся собственными для всех трех операторов: внутреннего спина M , изоспина T и гиперзаряда Y . Минимальное число осцилляторов N_{\min} , дающее возможность построить все унитарные мультиплеты с коммутирующими операторами T, M, M_z, T_3 и Y , равно трем. Именно случай трех осцилляторов ($N = 3$) и обсуждается ниже. Отметим вместе с тем, что при $N = 4$ роль группы $SU(3)$ играет уже группа $SU(4)$, также обсуждаемая в литературе [325, 337] в связи с квантовым числом «чарм» и Ψ -частицами.

Итак, положим $N = 3$ и введем операторы ($\alpha = 1, 2, 3$)

$$a_i^\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(u_i^\alpha + \frac{\partial}{\partial u_i^\alpha} \right); \quad a_i^{\alpha\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(u_i^\alpha - \frac{\partial}{\partial u_i^\alpha} \right), \quad (2.10)$$

удовлетворяющие соотношениям

$$[a_i^\alpha, a_j^{\beta\dagger}] = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}; \quad [a_i^\alpha, a_j^\beta] = [a_i^{\alpha\dagger}, a_j^{\beta\dagger}] = 0. \quad (2.11)$$

Очевидно, что

$$L_b = \sum_{\alpha=1}^3 \omega_{\alpha b} (a_i^{\alpha\dagger} a_i^\alpha + 1); \quad L_m = \sum_{\alpha=1}^3 \omega_{\alpha m}^2 (a_i^{\alpha\dagger} a_i^\alpha + 1). \quad (2.12)$$

Оператор

$$T^{\alpha\beta} = a_i^{\alpha\dagger} a_i^\beta \quad (2.13)$$

удовлетворяет коммутационным соотношениям группы $U(3)$:

$$[T^{\alpha\beta}, T^{\gamma\delta}] = \delta_{\beta\gamma} T^{\alpha\delta} - \delta_{\alpha\delta} T^{\gamma\beta}. \quad (2.14)$$

Оператор момента количества движения, связанный с переменными u_i^α ,

$$M_{ij} = -i \sum_{\alpha=1}^3 (a_i^{\alpha\dagger} a_j^\alpha - a_j^{\alpha\dagger} a_i^\alpha) \quad (2.15)$$

коммутирует со всеми генераторами группы $U(3)$:

$$[T^{\alpha\beta}, M_{ij}] = 0. \quad (2.16)$$

Поскольку операторы T_3 , T и Y выражаются через операторы $T^{\alpha\beta}$ (см. ниже), соотношение (2.16) обеспечивает коммутацию оператора спина M_{ij} с T_3 , T и Y .

Каждое решение уравнений (2.7) характеризуется прежде всего главным квантовым числом n , равным

$$n = \sum_{\alpha=1}^3 (n_1^\alpha + n_2^\alpha + n_3^\alpha). \quad (2.17)$$

Если частоты ω_α одинаковы, то все решения с данным n имеют одинаковую массу; если же частоты ω_α разные, то решения с данным n группируются по различным уровням. Однако все они принадлежат одному и тому же унитарному мультиплету группы $U(9)$, задаваемому старшим весом $(n \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0)$. Отсюда вытекает, что и унитарные мультиплеты группы $U(3)$, вообще говоря, будут содержать состояния с разными массами.

Определим значения спиновых моментов для некоторых нижних уровней. Для этого мы сначала сузим представление группы $U(9)$ до группы $U(3) \times U(3)$, а затем еще раз сузим полученные представления до группы $U(3) \times O(3)$. Правила первой редукции вытекают из теории групп. Мультиплет с $n = 0$ есть унитарный синглет с моментом нуль, мультиплет с $n = 1$ остается неприводимым и имеет старший вес $[(100), (100)]$. Мультиплет $(200 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0) = [(200), (200)] + [(110), (110)]$; мультиплет с $n = 3$ имеет содержание

$$(300 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0) = [(300), (300)] + [(210), (210)] + [(111), (111)].$$

Правила последующей редукции выводятся на основе формулы для характеров неприводимых представлений группы $SU(3)$. Характер $\chi_{m_1 m_2}$ неприводимого представления, задаваемого старшим весом (m_1, m_2) , имеет вид

$$\chi_{m_1 m_2} = \begin{vmatrix} \chi_{m_1} & \chi_{m_1+1} \\ \chi_{m_2-1} & \chi_{m_2} \end{vmatrix} = \chi_{m_1} \chi_{m_2} - \chi_{m_1+1} \chi_{m_2-1}, \quad (2.18)$$

где χ_m есть характер неприводимого представления группы $SU(3)$ со старшим весом $(m, 0)$; в то же время χ_m содержит все те моменты, которые есть у уровня трехмерного осциллятора с главным квантовым числом m , т. е. моменты $l = m, l = m - 2, \dots$ до $l = 0$ (четное m) или 1 (нечетное m). Отсюда получаем, что моменты, которые содержатся в представлении (m_1, m_2) , следует искать по такому правилу: складываем между собой все моменты в представлениях $(m_1, 0)$, $(m_2, 0)$ и в представлениях $(m_2 - 1, 0)$, $(m_1 + 1, 0)$, а затем из первой суммы вычитаем вторую. Для октета, таким образом, присутствуют моменты 2 и 1 (размерность 8).

По этому правилу нетрудно получить состав по моментам для любого мультиплетта группы $SU(3)$.

Определим число состояний для главного квантового числа n . Для нашего случая $n = 3$, $n \times N = 9$ и $R(0) = 1$, $R(1) = 9$, $R(2) = 45$, $R(3) = 165$. Следовательно, содержание состояний по моменту и мультиплеттам группы $SU(3)$ следующее:

$$\begin{aligned} n = 0 &= (0,0); \\ n = 1 &= (3,3); \\ n = 2 &= (6,5) + (6,1) + (3,3); \\ n = 3 &= (10,7) + (10,3) + (8,5) + (8,3) + (1,1); \\ n = 6 &= (28,13) + (28,9) + (28,5) + (28,1) + (35,11) + \\ &+ (35,9) + (35,7) + (35,5) + (35,3) + (27,9) + (27,7) + \\ &+ (27,5) + (27,1) + (10,7) + (10,3) + (10,7) + (10,3) + \\ &+ (8,5) + (8,3) + (1,1). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Здесь использованы обычные обозначения: в правой части в скобках слева стоит индекс мультиплетта группы $SU(3)$, а справа — значение $2l + 1$, где l — момент. Из этих разложений можно видеть, что нижние состояния $n = 1$ и $n = 2$ отвечают кваркам, имеется синглет $n = 0$, только для $n = 3$ появляются октет и декуплет.

Можно дополнительными условиями исключить кварковые решения. Здесь мы можем указать, например, на две возможности. Наложим на Ψ дополнительное условие [51]

$$\exp\left(i \frac{2\pi}{3} L_1\right) \Psi = \Psi; \quad L_1 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \left(-\frac{\partial^2}{\partial u_i^\alpha \partial u_i^\alpha} + u_i^\alpha u_i^\alpha \right) - 3. \quad (2.20)$$

Условие на Ψ_j является точно таким же. Для функций $\varphi(u_i^\alpha)$, удовлетворяющих уравнениям (2.7), действие оператора L_1 есть умножение на

$$n = \sum_{\alpha=1}^3 (n_1^\alpha + n_2^\alpha + n_3^\alpha).$$

Поэтому условие (2.20) означает, что n должно делиться на 3 и, таким образом, $n = 0, 3, 6, \dots$. Тем самым мы отбрасываем «кварковые» состояния с $n = 1$ и 2. Однако и в этих условиях остается «лишний» уровень с $n = 0$. Если использовать вместо (2.20) условие

$$\left[\exp\left(i \frac{\pi}{6} L_1\right) + \exp\left(-i \frac{\pi}{6} L_1\right) \right] \Psi = 0, \quad (2.21)$$

то в этом случае допустимые значения n равны 3, 9, 15.

В любом из рассмотренных случаев нас интересует в первую очередь уровень $n = 3$, которому отвечают декуплеты со спинами

3 и 1, октеты со спинами 2 и 1 и синглет со спином 0 (см. (2.19)). Мы, однако, еще не учли спина, связанного с «центром масс» частиц. Этот спин в случае уравнения (2.1) равен $1/2$, а для уравнения (2.2) равен 1. В системе покоя можно обычным образом складывать «орбитальный спиновый момент», о котором шла речь выше (момент M_{ij} , связанный с переменными u_i^α), и собственно спиновый момент (матрицы γ_μ в (2.1), индекс j в (2.2)). Поступая таким образом, приходим к заключению, что в состоянии $n = 3$ для барионов имеются декуплеты со спинами (речь идет о суммарном спине s) $1/2$, $3/2$, $5/2$ и $7/2$, октеты со спинами $1/2$, $3/2$ и $5/2$ и синглет со спином $1/2$. Для мезонов имеются декуплеты со спинами 0, 1, 2, 2, 3, 4, октеты с суммарным спином 0, 1, 1, 2, 2, 3 и синглет со спином 1 (когда дважды указывается один и тот же спин, это означает, что имеются два разных решения, или, точнее, две группы решений с тем же спином).

Операторы гиперзаряда Y , проекции изоспина T_3 , квадрата изоспина T^2 , «орбитального спина» M_z и M^2 имеют вид (см. (2.13))

$$\begin{aligned} Y &= -2/3(T^{11} - T^{33}) + 1/3(T^{22} - T^{33}); \\ T_3 &= -1/2(T^{22} - T^{33}); \\ T^2 &= 1/2(T^{12}T^{21} + T^{21}T^{12}) + T_3^2; \\ M_z &= -i \sum_{\alpha=1}^3 (a_1^{\alpha\dagger} a_2^\alpha - a_2^{\alpha\dagger} a_1^\alpha); \\ M^2 &= M_{12}^2 + M_{23}^2 + M_{31}^2. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Все эти операторы коммутируют.

Перейдем к вопросу о массах частиц, основываясь на формулах (2.8) и (2.9), которые содержат по три параметра — частоты $\omega_{\alpha b}$ или $\omega_{\alpha m}^2$ ($\alpha = 1, 2, 3$).

В рассматриваемом приближении, когда используется выражение (2.3) для операторов массы L , массы частиц октета и декуплета, имеющих одинаковые квантовые числа, совпадают и не зависят от спина. Если частоты ω_α различны, то массы некоторых частиц внутри унитарных мультиплетов различаются между собой.

Отметим, что мультиплеты с более высокой размерностью, например 27-плет, появляются при $n = 6, 9, \dots$ и имеют более высокие массы.

Мы видим, что можно построить систему релятивистски-инвариантных уравнений, которая в качестве решений имеет состояния (мультиплеты), связанные с группой $SU(3)$.

Обсудим теперь вопрос о динамической симметрии рассматриваемой модели. Если не накладывать дополнительных условий Маркова [339, 340] (2.5), (2.6), то оператор (2.3) обладает некомпактной группой инвариантности и бесконечнократным вырождением уровней, описываемым группой $U(3N, N)$ ($U(9, 3)$).

Генераторы этой группы имеют следующий вид:

$$T_{\mu\nu}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(u_{\mu}^{\alpha} - \frac{\partial}{\partial u_{\mu}^{\alpha}} \right) \left(u_{\nu}^{\beta} + \frac{\partial}{\partial u_{\nu}^{\beta}} \right).$$

Если же учесть дополнительное условие (2.5), то группа инвариантности станет компактной группой $U(9)$. Весь спектр масс с учетом дополнительных условий (2.5) может быть связан в одно неприводимое представление некомпактной группы $U(9,1)$. Ее генераторы имеют вид

$$T_{i\alpha}^{j\beta} = a_{\alpha}^{\dagger} a_{j\beta} \quad (\alpha, \beta, i, j = 1, 2, 3);$$

$$T_{10}^{10} = -1 - \sum_{i, \alpha=1}^3 a_{i\alpha}^{\dagger} a_{i\alpha}; \quad T_{i\alpha}^{10} = i a_{i\alpha}^{\dagger} - \sqrt{-T_{10}^{10}}. \quad (2.23)$$

Марков предложил [340] уравнение следующего вида:

$$\left\{ i\gamma_{\mu} k_{\mu} + m_0 + a \left[-\frac{\partial^2}{\partial \xi_{\mu} \partial \xi_{\mu}} + \xi_{\mu} \xi_{\mu} + 2 \frac{(k_{\mu} \partial / \partial \xi_{\mu})^2 - (k_{\mu} \xi_{\mu})^2}{k_{\mu} k_{\mu}} \right] \right\} \Psi = 0. \quad (2.24)$$

(Обозначения — из работы [340].) В системе покоя, в которой импульсы центра масс $k = 0$, массовый оператор принимает следующую простую форму:

$$m = m_0 + a \left(\xi_0^2 + \xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 - \frac{\partial^2}{\partial \xi_0^2} - \frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} - \frac{\partial^2}{\partial \xi_3^2} \right). \quad (2.25)$$

Рассмотрим динамическую симметрию уравнения (2.24). Легко увидеть, что операторы

$$T_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \left[\left(\xi_{\mu} - \frac{\partial}{\partial \xi_{\mu}} \right) \left(\xi_{\nu} + \frac{\partial}{\partial \xi_{\nu}} \right) \right] \quad (\mu, \nu = 0, 1, 2, 3);$$

$$T_{\mu 4} = \frac{i}{2\sqrt{2}} \left[\xi_{\mu} - \frac{\partial}{\partial \xi_{\mu}} \right] \left[\left(\xi_{\nu} - \frac{\partial}{\partial \xi_{\nu}} \right) \left(\xi_{\nu} + \frac{\partial}{\partial \xi_{\nu}} \right) + 1 \right]^{1/2}; \quad (2.26)$$

$$T_{44} = -1 - \frac{1}{2} \left[\left(\xi_{\nu} - \frac{\partial}{\partial \xi_{\nu}} \right) \left(\xi_{\nu} + \frac{\partial}{\partial \xi_{\nu}} \right) \right]$$

связывают состояния разных масс в одно неприводимое представление некомпактной группы $U(4,1)$. Группой инвариантности массового оператора (2.25) является группа $U(4)$. Операторы Казимира для представления (2.26) могут быть найдены и сводятся к числам. Другое уравнение, рассмотренное Марковым [340], имеет вид

$$\left\{ i\gamma_{\mu} k_{\mu} + m_0 + a \left[-\frac{\partial^2}{\partial \xi_{\mu} \partial \xi_{\mu}} + \xi_{\mu} \xi_{\mu} + 2 \frac{(k_{\mu} \partial / \partial \xi_{\mu})^2 - (k_{\mu} \xi_{\mu})^2}{k_{\mu} k_{\mu}} \right] \right\} \Psi = 0. \quad (2.27)$$

Интересно, что спектр масс, связанный с этим уравнением, является спектром трехмерного осциллятора. В связи с этим можно

построить динамическую симметрию уравнения (2.27). Группа симметрии массового оператора

$$m = m_0 + 2a \left(\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 - \frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} - \frac{\partial^2}{\partial \xi_3^2} \right) \quad (2.28)$$

является группой $U(3)$.

Некомпактная группа $U(3, 1)$, генераторы которой строятся аналогично генераторам (2.23), связывает все состояния дискретного спектра массового оператора в одно неприводимое представление, аналогично рассмотренному в первой главе случаю атома водорода. Таким образом, мы видим, что многие релятивистские модели, описываемые релятивистскими волновыми уравнениями, обладают динамическими группами симметрии, аналогично квантовомеханическим уравнениям.

§ 3: Уравнение Майорана

В настоящем параграфе рассмотрим еще один тип релятивистских уравнений с точки зрения динамических симметрий, а именно уравнение Майорана [322]. Прежде всего кратко обсудим возможные способы обобщения релятивистского уравнения Дирака.

Релятивистские уравнения со спектром масс обычно представляют собой то или иное обобщение уравнений Дирака либо Клейна — Гордона:

$$\gamma_\mu p_\mu \Psi = m \Psi, \quad \mu = 0, 1, 2, 3; \quad (3.1)$$

$$p_\mu p_\mu \Phi = m^2 \Phi, \quad \mu = 0, 1, 2, 3. \quad (3.2)$$

(Мы работаем в системе единиц с $\hbar = c = 1$.) По дважды повторяющимся греческим индексам подразумевается суммирование от 0 до 3 с учетом псевдоевклидовой метрики Минковского. Скалярное произведение двух 4-векторов задается формулой $ab = a_\mu b_\mu = = a_0 b_0 - \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$. Операторы импульса имеют вид $p_0 = i \partial / \partial t$, $\mathbf{p} = = -i \partial / \partial \mathbf{x}$. В уравнении Дирака матрицы γ_μ имеют стандартный вид

$$\gamma_0 = \begin{vmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{vmatrix}; \quad \boldsymbol{\gamma} = \begin{vmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{vmatrix}, \quad (3.3)$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ — обычные матрицы Паули:

$$\sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}; \quad \sigma_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}; \quad \sigma_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}, \quad (3.4)$$

а I — двухрядная единичная матрица. Уравнения (3.1), (3.2) запишаны в таком виде, что масса покоя m играет роль собственного значения оператора, стоящего в левой стороне равенства.

Основное свойство или требование к релятивистскому уравнению заключается в том, чтобы его вид не менялся при переходе из одной инерциальной системы координат в другую. Это условие выполняется благодаря тому, что масса m является скаляром (инвариантна при переходах в различные инерциальные системы координат), а матрицы γ_μ преобразуются как 4-векторы. Действительно, так как скалярное произведение двух 4-векторов является скаляром, выражение $\gamma_\mu p_\mu$ не меняется при переходе из одной инерциальной системы координат в другую. Это утверждение эквивалентно тому, что волновая функция Ψ преобразуется по некоторому представлению группы Лоренца. Мы напомним хорошо известные свойства уравнений Дирака и Клейна — Гордона, для того чтобы подойти к вопросу о путях обобщения этих уравнений. Что фактически обеспечивает нам релятивистскую инвариантность этих уравнений? Во-первых, скалярность массы, во-вторых, то, что импульс p_μ множится скалярно на 4-вектор. При любых обобщениях уравнений Дирака и Клейна — Гордона пользуются этими простыми соображениями.

Иногда вводят другие 4-векторы Γ_μ , заменяя ими матрицы Дирака γ_μ . Если эти векторы являются конечномерными матрицами, мы имеем конечнокомпонентные релятивистские уравнения [332, 50]. Если же эти векторы являются бесконечномерными матрицами, мы имеем бесконечнокомпонентные уравнения (см. [341]). Можно поступать и по-другому, а именно ввести некоторый набор внутренних перемешных векторов u_μ^α ($\alpha = 1, \dots, N$). Эти перемешные описывают в каком-то смысле внутреннюю структуру элементарных частиц. А затем массу в уравнении Дирака или Клейна — Гордона заменить на скалярный оператор, зависящий от введенных внутренних переменных. Такой способ построения релятивистских уравнений и был предложен в работе Гинзбурга и Тамма [323]. Конечно, не обязательно использовать только 4-векторы. Можно также использовать любые ковариантные величины, например тензоры (см. обсуждение этого вопроса в статье Гинзбурга [324]). Внутренние переменные можно вводить не только в оператор массы, но и составлять инварианты, в которые входят также и переменные x_μ и p_μ (см. [323, 324, 339, 340]).

Именно описанным образом и строятся все предлагавшиеся до настоящего времени релятивистские уравнения со спектром масс. Таким образом, технически проблема сводится к подбору 4-векторов Γ_μ или скаляров $m(u_\mu)$. Конечно, выбор этих величин очень широк и требуются дополнительные соображения, ограничивающие этот выбор. Подчеркнем только, что любое условие на волновую функцию, наложенное с помощью любого скалярного оператора, подойдет в качестве релятивистского уравнения с точки зрения инвариантности при переходе из одной системы координат в другую. Поскольку вопрос о поиске релятивистских уравнений часто сводится к поиску операторов 4-векторов, рассмотрим подробнее свойства этих величин.

Бесконечно малые преобразования группы Лоренца удобно изображать следующей антисимметричной матрицей:

$$M_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & N_1 & N_2 & N_3 \\ -N_1 & 0 & M_3 & -M_2 \\ -N_2 & -M_3 & 0 & M_1 \\ -N_3 & M_2 & -M_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mu, \nu = 0, 1, 2, 3.$$

Операторы M отвечают бесконечно малым поворотам обычного трехмерного пространства, а операторы N — поворотам между осью времени и осями x, y, z . Операторы $M_{\mu\nu}$ удовлетворяют коммутационным соотношениям алгебры Ли группы $O(3,1)$ (группы линейных преобразований, сохраняющих интервал $t^2 - x^2$):

$$[M_{\mu\nu}, M_{\rho\sigma}] = i(g_{\nu\rho}M_{\mu\sigma} + g_{\mu\sigma}M_{\nu\rho} - g_{\nu\sigma}M_{\mu\rho} - g_{\mu\rho}M_{\nu\sigma}), \quad (3.5)$$

где матрица $g_{\mu\nu}$ имеет вид

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Коммутационные соотношения (3.5) можно переписать с помощью трехмерных векторов M и N :

$$\begin{aligned} [M_i, M_k] &= i\varepsilon_{ikl}M_l; & [M_i, N_k] &= i\varepsilon_{ikl}N_l; \\ [N_i, N_k] &= -i\varepsilon_{ikl}M_l. \end{aligned} \quad (3.7)$$

По определению 4-вектором называется оператор Γ_ν , удовлетворяющий коммутационным соотношениям

$$[M_{\lambda\mu}, \Gamma_\nu] = i(g_{\mu\nu}\Gamma_\lambda - g_{\nu\lambda}\Gamma_\mu). \quad (3.8)$$

Соотношения (3.4) — (3.8) написаны абстрактно. Под операторами можно понимать матрицы из любых представлений группы Лоренца, в частности неприводимых. Соответственно и 4-векторы Γ_ν будут являться матрицами линейных операторов, действующих в пространстве представления.

Рассмотрим теперь подробно уравнение Майорана. Хотя это уравнение и не является подходящим для описания свойств реальных элементарных частиц, оно является простой и удобной моделью, на которой можно продемонстрировать многие особенности бесконечнокомпонентных полей. Это уравнение изучалось в работах [342—347]. В этом случае вектор Γ_ν выбирается некоторым вполне определенным образом. А именно рассматривается конкретное представление группы Лоренца. В этом представлении операторы M и N реализуются с помощью бозонных операторов рождения и уничтожения или с помощью некоторого чисто вспомогательного двумерного квантового осциллятора [343]. Операторы M и N имеют вид

$$M = 1/2 a_i^\dagger \sigma_{ij} a_j; \quad N = i 4^{-1} [a_i^\dagger \sigma_{ij} (i\sigma_y)_{jk} a_k^\dagger + a_i (i\sigma_y)_{ij} \sigma_{jk} a_k]. \quad (3.9)$$

(По повторяющимся индексам $i, k, j = 1, 2$ ведется здесь и ниже суммирование от 1 до 2.) Операторы a_i, a_k^\dagger удовлетворяют стандартным соотношениям бозевских операторов рождения и уничтожения

$$[a_i, a_k^\dagger] = \delta_{ik}. \quad (3.10)$$

Эти операторы удовлетворяют также условию

$$(a_i)^\dagger = a_i^\dagger. \quad (3.11)$$

При этих условиях операторы M и N являются эрмитовыми и удовлетворяют коммутационным соотношениям (3.7), в чем можно убедиться прямой и недлинной проверкой. Поскольку операторы бесконечно малых преобразований M и N эрмитовы, отвечающие им операторы конечных поворотов $\exp(iM_{\mu\nu}\omega_{\mu\nu})$ унитарны. Унитарные представления группы Лоренца, задаваемые операторами (3.9), называют обычно представлениями Майорана. После того как реализовано представление группы Лоренца, т. е. указано, как преобразуется волновая функция Ψ при переходе из одной инерциальной системы координат в другую, можно подыскать вектор Γ_ν и тем самым получить обобщение уравнения Дирака. В случае уравнения Майорана этот вектор выбирают в виде

$$\begin{aligned} \Gamma_0 &= 1/2 (a_i^\dagger a_i + 1); \\ \Gamma &= 1/4 [a_i^\dagger \sigma_{ij} (-i\sigma_\nu)_{jk} a_k^\dagger + a_i (i\sigma_\nu)_{ij} \sigma_{jk} a_k]. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Действительно, соотношения коммутации (3.8) выполняются, что легко проверить прямым расчетом. Но построенный вектор Γ_ν обладает дополнительным свойством. Если прокоммутировать его компоненты друг с другом, то результат выразится через векторы M и N (или $M_{\mu\nu}$), что не выполняется для произвольного вектора:

$$[\Gamma_\mu, \Gamma_\nu] = -iM_{\mu\nu}. \quad (3.13)$$

Таким образом, десять величин $M_{\mu\nu}, \Gamma_\rho$ образуют замкнутую алгебру. Это алгебра Ли группы $O(3,2)$ или группы де Ситтера (локально-изоморфной симплектической группе $Sp(4, R)$; точнее, конкретного представления этой группы, называемого лестничным представлением). Неприводимые представления группы Лоренца задаются собственными значениями двух операторов Казимира:

$$C_1 = M \cdot N; \quad C_2 = M^2 - N^2. \quad (3.14)$$

Если произвести прямой расчет, воспользовавшись для представления Майорана формулами (3.9) и коммутационными соотношениями операторов рождения и уничтожения (3.10), то окажется, что все операторные величины в (3.14) сократятся, а останутся только числа, а именно:

$$M \cdot N = 0; \quad M^2 - N^2 = -3/4. \quad (3.15)$$

Обычно неприводимое представление группы Лоренца задается парой чисел (l_0, l_1) [341] таких, что $M \cdot N = il_0 l_1$, $M^2 - N^2 = l_0^2 + l_1^2 - 1$. Таким образом, получаем, что представление Майорана (3.9) приводимо и распадается на сумму двух представлений, задаваемых парами чисел $(l_0 = 0, l_1 = 1/2)$ и $(l_0 = 1/2, l_1 = 0)$. (Представление Майорана подробно обсуждается в работах [343—345].) Соотношения (3.15) учитывают только генераторы группы Лоренца. Если учесть также векторы Γ_ν и построить операторы Казимира группы $O(3,2)$, то окажется, что они также являются числами. Это легко увидеть, подсчитав с помощью (3.12) лоренц-инвариант $\Gamma_\mu \Gamma_\mu = \Gamma_0^2 - \Gamma^2 = -1/2$. Таким образом, неприводимая компонента представления группы де Ситтера, задаваемого формулами (3.9), (3.12), обладает тем свойством, что, будучи суженной на подгруппу Лоренца, остается неприводимой. Такое же свойство имеется и у неприводимого представления конформной группы или группы $O(4,2)$, описывающего спектр атома водорода [41]. Это представление остается неприводимым при сужении на подгруппу де Ситтера $O(4,1)$. Такие представления часто называют максимально вырожденными. Интересно, что именно такие представления используются при построении бесконечнокомпонентных уравнений на основе алгебраического подхода.

Посмотрим теперь, какой спектр масс дает уравнение Майорана, т. е. уравнение

$$(\Gamma_\mu p_\mu - m) \Psi(x) = 0, \quad (3.16a)$$

где операторы Γ_μ выбраны в виде (3.12). Для выяснения этого вопроса поступим следующим образом. Сначала перепишем уравнение (3.16a) для фурье-компонент функции $\Psi(x)$. Оно примет вид

$$(\Gamma_\mu p_\mu - m) \Psi(p) = 0. \quad (3.16b)$$

Здесь p_μ — не оператор, а 4-вектор энергии-импульса. Возьмем случай времениподобного 4-импульса, т. е. $p_\mu p_\mu > 0$. Тогда, совершив переход в систему покоя, можно привести этот вектор к следующему виду: $p = (p_0, 0, 0, 0)$. Уравнение (3.16b) в этой системе сводится к следующему уравнению:

$$(\Gamma_0 p_0 - m) \Psi(p) = 0. \quad (3.17)$$

Таким образом, вопрос о нахождении спектра масс эквивалентен вопросу о диагонализации матрицы Γ_0 (3.12). Вид этой матрицы говорит нам о ее спектре, фактически о спектре двумерного квантового осциллятора. Мы получаем падающий спектр масс для инварианта $p_\mu p_\mu$, т. е.

$$p_\mu p_\mu = m_0^2 = m^2 (s + 1/2)^{-2}, \quad (3.18)$$

где s — главное квантовое число фиктивного двумерного квантового осциллятора, деленное пополам. Остается только выяснить смысл этого числа. Для этого посмотрим на явный вид оператора квадрата момента количества движения M^2 , даваемого формулой

(3.9). Легко непосредственно вычислить этот оператор через операторы рождения и уничтожения. Мы будем иметь следующее:

$$M^2 = \frac{1}{2} a_i^\dagger a_i (\frac{1}{2} a_k^\dagger a_k + 1), \quad (3.19)$$

т. е. собственные числа оператора квадрата момента количества движения выражаются как раз через число s :

$$M^2 \Psi = s(s + 1) \Psi. \quad (3.20)$$

Таким образом, смысл числа s , стоящего в формуле для спектра масс, заключается в том, что это число совпадает со спином состояния. Как видно из формул (3.19), (3.20), спин s может принимать любые целые и полуцелые значения. Это обстоятельство связано с тем, что представление группы Лоренца, задаваемое формулами (3.9), приводимо. Одна неприводимая компонента ($l_0 = \frac{1}{2}$, $l_1 = 0$) содержит только полуцелые значения спина, а вторая неприводимая компонента содержит только целые значения спина. Подпространство состояний, отвечающих первому случаю, состоит из всех векторов состояний, разлагающихся только по нечетным состояниям двумерного квантового осциллятора, а подпространство состояний, отвечающих целым спином, есть линейное подпространство с базисом из четных состояний двумерного осциллятора. Поэтому, говоря об уравнении Майорана, необходимо конкретизировать, по какому именно неприводимому представлению преобразуется волновая функция, поскольку формулы для генераторов (3.9) имеют один вид в обоих представлениях. Конкретизация достигается наложением дополнительного условия на четность главного квантового числа фиктивного двумерного квантового осциллятора. Спектр масс (3.18) является падающим спектром.

Обсудим теперь динамическую симметрию уравнения Майорана в рассматриваемом в предыдущих параграфах смысле (см. § 3 гл. I). Группой инвариантности уравнения Майорана в системе покоя (3.17) является, очевидно, группа $U(2)$. Ее четыре генератора строятся из операторов a_i , a_i^\dagger ($i = 1, 2$) по формуле $T_{ik} = a_i^\dagger a_k$. Однако спектр масс уравнения Майорана, поскольку он аналогичен спектру гамильтониана двумерного осциллятора, можно описать, как и при рассмотрении релятивистских осцилляторных моделей, с помощью группы динамической симметрии $U(2, 1)$. Генераторы этой группы объединяют в одно представление все уровни, отвечающие значениям масс (3.18) как с целыми, так и с полуцелыми спинами. Формулы для генераторов аналогичны строившимся в предыдущем параграфе.

§ 4. Симметрия уравнений движения свободной релятивистской частицы

Гамильтониан для свободной релятивистской частицы со спином $\frac{1}{2}$ имеет вид

$$\mathcal{H} = \alpha p + \beta m, \quad (4.1)$$

где α и β — стандартные четырехрядные матрицы Дирака [196].

С оператором \mathcal{H} коммутируют оператор полного момента j и оператор Дирака

$$K = \beta (\sigma L + 1). \quad (4.2)$$

В силу этого состояния с определенной энергией E можно выбрать так, чтобы они обладали определенным полным моментом j^2 , его проекцией j_z и оператором Дирака K :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \Psi_{Ekm} &= E \Psi_{Ekm}; & K \Psi_{Ekm} &= k \Psi_{Ekm}; \\ j_z \Psi_{Ekm} &= m \Psi_{Ekm}; & j^2 \Psi_{Ekm} &= (k^2 - 1/4) \Psi_{Ekm}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Бесконечный набор волновых функций с $j = 1/2, 3/2, 5/2$ и $k = \pm |j + 1/2|$ (где k — собственное значение оператора Дирака) образует базис в пространстве состояний с определенной энергией E . Легко проверить, что операторы X_i :

$$X_1 = \frac{\sigma p}{|p|}; \quad X_2 = \frac{\beta \sigma A}{|K|}; \quad X_3 = \frac{K}{|K|}, \quad (4.4)$$

где $A = ([L \times p] - [p \times L])/2 |p|$, $p = (E^2 - m^2)^{1/2}$, коммутируют с полным моментом j и свободным гамильтонианом \mathcal{H} [56].

Операторы X_i подчиняются коммутационным соотношениям

$$[X_\alpha, X_\beta] = 2i \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} X_\gamma; \quad \{X_\alpha, X_\beta\} = 2\delta_{\alpha\beta} \quad (4.5)$$

и, следовательно, являются генераторами спиральной группы $SU(2)$. Название «спиральная группа» связано с тем, то оператор X_1 является оператором спиральности.

В двумерном пространстве состояний с заданными энергией, квадратом момента j^2 и проекцией j_z , базис в котором образуют функции Ψ_{Ekm} с разными $k = \pm |j + 1/2|$, матрицы операторов X_α совпадают с σ -матрицами Паули. Двукратное вырождение по знаку k объясняется наличием спиральной группы симметрии $SU(2)$.

Следуя [56], определим операторы:

$$\begin{aligned} \tilde{L} &= \frac{1}{2} \left\{ 2L + \sigma - p \frac{\sigma p}{|p|^2} + \beta \left(\sigma - p \frac{\sigma p}{|p|^2} \right) \right\}; \\ \tilde{\Sigma} &= -\beta \sigma + p \frac{\sigma p}{|p|^2} + \beta p \frac{\sigma p}{|p|^2}; \\ \tilde{A} &= \frac{1}{2|p|} \{ [p \times \tilde{L}] - [\tilde{L} \times p] \}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Легко проверить, что эти операторы коммутируют с гамильтонианом (4.1) и удовлетворяют коммутационным соотношениям прямого произведения группы Лоренца и унитарной группы

$SU(2)$:

$$\begin{aligned} [\tilde{L}_i, \tilde{L}_j] &= i\varepsilon_{ijl}\tilde{L}_l; & [L_i, A_j] &= i\varepsilon_{ijl}\tilde{A}_l; \\ [A_i, A_j] &= -i\varepsilon_{ijl}\tilde{L}_l; & [\tilde{L}_i, \tilde{\Sigma}_j] &= [A_i, \tilde{\Sigma}_j] = 0; \\ [\tilde{\Sigma}_i, \tilde{\Sigma}_j] &= 2i\varepsilon_{ijl}\tilde{\Sigma}_l. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Таким образом, в бесконечномерном пространстве состояний Ψ_{Ekm} с заданной энергией реализуется унитарное представление группы $SL(2, C) \otimes SU(2)$, являющееся тензорным произведением представления группы Лоренца с $\rho = 0$ и $m = 0$ (см. [50]) и спинорного представления группы $SU(2)$. Легко сосчитать операторы Казимира для алгебры (4.6). Имеем

$$C_1 = (\tilde{L} + i\tilde{A})^2 = -1; \quad \tilde{\Sigma}^2 = 3, \quad C_2 = (\tilde{L} - i\tilde{A})^2 = 1.$$

Отсюда и вытекает сформулированный вывод.

Покажем теперь, что в данной задаче возможно появление не вполне приводимого представления группы Лоренца. Для этого рассмотрим, следуя [56], два векторных оператора:

$$j = \tilde{L} + \tilde{\Sigma}/2; \quad k = \tilde{A} + i\tilde{\Sigma}/2. \quad (4.8)$$

Эти операторы обладают коммутационными соотношениями алгебры Ли группы $SL(2, C)$:

$$\begin{aligned} [j_i, j_m] &= i\varepsilon_{iml}j_l; \\ [j_k, k_m] &= \varepsilon_{iml}k_l; & [k_i, k_m] &= -i\varepsilon_{iml}k_l. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Оператор j есть оператор полного момента количества движения.

Вычислим теперь операторы Казимира этой группы. Имеем

$$\begin{aligned} C_1 &= (j + ik)^2 = -1; \\ C_2 &= (j - ik)^2 = -2(1 + X_1)K; \quad C_2^2 = 0. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Это означает, что данное представление не вполне приводимо. В двумерном пространстве, базис которого образует состояния $\Psi_{E, k, m}$, $\Psi_{E, -k, m}$, оператор C_2 может быть приведен только к треугольному виду. Представления группы Лоренца такого типа рассмотрены Желобенко [348]. Существование таких представлений в свободном уравнении Дирака связано с его релятивистской инвариантностью.

§ 5. Динамическая симметрия релятивистской частицы в магнитном поле

Рассмотрим теперь релятивистскую частицу со спином нуль в однородном магнитном поле. Уравнение, описывающее ее поведение, имеет вид

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} + m^2 + p_z^2 + (p_x - eA_x)^2 + (p_y - eA_y)^2 \right] \Psi = 0, \quad (5.1)$$

где векторный потенциал $A = 1/2 [\mathbf{H} \times \mathbf{r}]$, поле $\mathbf{H} = (0, 0, H)$. Ясно, что определенные выше операторы A_{ik} ($i, k = 2, 3$) (см. (7.26) гл. I) коммутируют с уравнением (5.1) и определяют его группу инвариантности $U(1,1)$. Используя определения (7.5), (7.6) гл. I, легко получить спектр энергий:

$$E = \pm [m\omega (2n_1 + 1) + m^2 + p_z^2]^{1/2}. \quad (5.2)$$

Основное состояние $p_z = 0$, $n_1 = 0$ задается формулой

$$E_{\pm}^0 = (m\omega + m^2)^{1/2}. \quad (5.3)$$

Следует отметить, что подобный спектр частицы в магнитном поле, описываемой в рамках теории бесконечномерных релятивистских инвариантных уравнений, обсуждался в работе [349]. Все рассуждения § 7 гл. I (см. [359]) полностью переносятся на рассматриваемый случай; функции, являющиеся решениями уравнения (5.1) при фиксированном знаке энергии, даются формулами (7.14), (7.15), (7.17) гл. I (решения с различными знаками энергии отличаются экспоненциальным множителем $\exp(\pm iEt)$). Поэтому на состояниях релятивистской заряженной частицы со спином нуль при фиксированных p_z и знаке энергии реализуется одно бесконечномерное представление группы $U(2,1)$, задаваемое операторами (7.26) гл. I. На состояниях с фиксированным импульсом p_z и энергией E реализуется одно неприводимое представление группы инвариантности $U(1,1)$, задаваемое операторами Казимира (7.28) гл. I.

Гамильтониан, описывающий дираковскую частицу в магнитном поле, имеет вид

$$\mathcal{H} = \alpha (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) + \beta m, \quad (5.4)$$

где матрицы α , β — стандартные четырехрядные матрицы.

Следуя работе [350], используем для рассмотрения собственных функций гамильтониана (5.1) метод квадрирования. Запишем уравнение для волновой функции в виде

$$O_+ \Psi_E \equiv (\mathcal{H} - E) \Psi_E = 0. \quad (5.5)$$

Рассмотрим квадрированное уравнение

$$O_- O_+ \Phi_E = (\mathcal{H} + E) (\mathcal{H} - E) \Phi_E = 0, \quad (5.6)$$

которое уже не содержит четырехрядных матриц и приводится к виду

$$[\mathcal{H}_{\perp} + (p_z^2 + m^2)/2m - \omega\sigma_z/2 - E^2/2m] \Phi_E = 0. \quad (5.7)$$

Связь между функциями Ψ_E и Φ_E обычная:

$$\Psi_E = O_- \Phi_E, \quad (5.8)$$

если четырехкомпонентная функция Φ_E выбрана в виде

$$\Phi_E = \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi_E \end{pmatrix}, \quad (5.9)$$

где φ_E — двухкомпонентная функция.

Метод квадрирования уравнения Дирака позволяет по интегралам движения квадрированного уравнения находить интеграл движения исходного линейного уравнения. Этот способ легко позволяет находить группы инвариантности для релятивистских моделей атома водорода и свободного движения [56]. В матричной форме оператор O_- имеет вид

$$O_- = \begin{pmatrix} E + m & \sigma(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \\ \sigma(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) & E - m \end{pmatrix}. \quad (5.10)$$

Операторы

$$R = \sigma(\mathbf{p} - e\mathbf{A}); \quad C = \mathcal{H} - m \quad (5.11)$$

удовлетворяют соотношениям

$$R^2 = \mathcal{H}^2 - m^2; \quad C^2 = \mathcal{H}^2 + m^2 - 2\mathcal{H}m. \quad (5.12)$$

Пусть $L_i = \begin{pmatrix} L_i & 0 \\ 0 & L_i \end{pmatrix}$ — интегралы движения квадрированного уравнения. Тогда интеграл движения линейного уравнения строится с помощью операторов R и C :

$$\tilde{L}_i = \begin{pmatrix} RL_iR^{-1} & 0 \\ 0 & CL_iC^{-1} \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

Такую конструкцию можно построить, если существуют обратные операторы R^{-1} , C^{-1} . Из (5.13) ясно, что коммутационные соотношения операторов \tilde{L}_i совпадают с коммутационными соотношениями операторов L_i . Легко видеть, что с уравнением (5.7) коммутируют те же операторы, что и с уравнением (7.1) гл. I. Операторы b и b^\dagger коммутируют также с линейным уравнением, с которым коммутирует оператор $\sigma(\mathbf{p} - e\mathbf{A})$. С помощью описанного способа переноса интегралов квадрированного уравнения на линейный случай легко построить следующие, коммутирующие с гамильтонианом (5.4), операторы:

$$\tilde{\sigma}_z = \begin{pmatrix} R\sigma_zR^{-1} & 0 \\ 0 & C\sigma_zC^{-1} \end{pmatrix}; \quad \tilde{M}_z = \begin{pmatrix} RM_zR^{-1} & 0 \\ 0 & CM_zC^{-1} \end{pmatrix}. \quad (5.14)$$

Легко убедиться, что выполняется соотношение

$$\tilde{M}_z + \tilde{\sigma}_z/2 = j_z, \quad (5.15)$$

где j_z — проекция углового момента на направление поля. Операторы спиральной группы инвариантности (см. (7.23) гл. I) также переносятся на релятивистский случай для частицы без аномального магнитного момента. Следует отметить, что интегралы

движения, объясняющие двукратное вырождение, строились ранее в работе [350]:

$$\tilde{X}_i = \left\| \begin{array}{cc} RX_i R^{-1} & 0 \\ 0 & CX_i C^{-1} \end{array} \right\|. \quad (5.16)$$

Между операторами \tilde{M}_z , $a^\dagger a$ и $b^\dagger b$ имеется связь:

$$\tilde{M}_z = \tilde{a}^\dagger a - b^\dagger b. \quad (5.17)$$

Спектр энергий, как видно из уравнения (5.7), равен

$$E = \pm [m\omega (2n_1 + 1 - 2s_z) + p_z^2 + m^2]^{1/2}. \quad (5.18)$$

Операторы R и C обращаются в нуль на одном состоянии с $p_z = 0$, $n_1 = 0$, $s_z = 1/2$. При любом фиксированном ненулевом импульсе операторы R , C имеют обратные. Для состояний с $n_1 > 0$ существуют обратные операторы R^{-1} , C^{-1} , и операторы спиральной группы (5.16) являются генераторами группы $SU(2)$, коммутирующими с операторами b^\dagger , b , поскольку их можно нормировать, как и в случае нерелятивистской частицы. Случай пространства состояний с нулевым импульсом $p_z = 0$ требует особого рассмотрения, поскольку на состояниях с $n_1 = 0$ операторы R , C обращаются в нуль. Однако можно сконструировать и в этом случае алгебру $U(2, 1)$, представление которой реализуется на данном пространстве состояний. Дело в том, что легко построить штрихованные операторы с помощью предельного перехода. Хотя R и C обращаются в нуль, мы имеем при построении решений произведения RR^{-1} и CC^{-1} , которые заменяем единицей. На этом основании легко доопределить штрихованные операторы там, где не существует обратных операторов для R и C . Рассмотрим пространство D состояний с фиксированными p_z . Построим операторы \tilde{a} , \tilde{a}^\dagger , \tilde{b} , \tilde{b}^\dagger по правилу (5.13). Из этих операторов построим группу $U(2, 1)$ по формулам (7.26) гл. I, где вместо операторов a , b , a^\dagger , b^\dagger поставим операторы \tilde{a} , \tilde{b} , \tilde{a}^\dagger , \tilde{b}^\dagger . Ввиду того, что правило сопоставления операторов (5.13) не нарушает коммутационных соотношений, можно сделать следующий вывод.

В пространстве состояний релятивистской заряженной частицы со спином $1/2$ в однородном магнитном поле с фиксированными p_z , s_z и фиксированным знаком энергии реализуется одно бесконечномерное унитарное неприводимое представление динамической группы $U(2, 1)$, задаваемое операторами Казимира (7.28) гл. I. На подпространстве состояний с заданной энергией D_n и фиксированным импульсом p_z в случае $n_1 > 0$ реализуется неприводимое представление группы симметрии гамильтониана $U(1, 1) \otimes SU(2)$ с операторами Казимира (7.30) гл. I. На состояниях — аналогах состояний (7.21) гл. I — реализуется спинорное представление спиральной группы $SU(2)$.

Когерентные состояния и функции Грина релятивистских квадратичных систем

§ 1. Движение релятивистской заряженной частицы в однородном стационарном электромагнитном поле

Волновая функция, описывающая состояние релятивистской заряженной частицы со спином нуль, движущейся в постоянных электрическом \mathbf{E} и магнитном \mathbf{H} полях, удовлетворяет уравнению Клейна — Гордона

$$[(p^\mu - eA^\mu)^2 - m^2] \Psi = 0. \quad (1.1)$$

Далее (как и прежде) используем систему единиц такую, что $\hbar = c = 1$. Четырехмерный векторный потенциал электромагнитного поля можно выбрать в виде

$$A^\mu = (-\mathbf{E}\mathbf{r}, \frac{1}{2} [\mathbf{H} \times \mathbf{r}]), \quad \mu = 0, 1, 2, 3, \quad (1.2)$$

а оператор импульса полагаем равным $p^\mu = i\partial^\mu = (i\partial/\partial t, -i\nabla)$.

Будем использовать стандартные обозначения и сокращения (см. [351]) для релятивистски-инвариантной записи. Метрический тензор полагаем равным $g^{00} = -g^{11} = -g^{22} = -g^{33} = 1$; скалярное произведение двух четырехмерных векторов будем записывать просто как $ab = a^\mu b_\mu$.

Функция Грина уравнения Клейна — Гордона удовлетворяет уравнению

$$(\pi^\mu \pi_\mu - m^2) G(x'', x') = \delta(x'' - x'), \quad (1.3)$$

где $\pi^\mu = p^\mu - eA^\mu$.

Для решения уравнений (1.1) и (1.3) Фоком [352, 353] был разработан метод собственного времени, в дальнейшем интенсивно использовавшийся в работах Намбу [355], Фейнмана [86] и Швингера [354], где с его помощью была найдена функция Грина.

Решение уравнения (1.1) связывается с помощью интегрального представления

$$\Psi(x) = \frac{1}{2i} \int \exp\left(-\frac{im^2 s}{2}\right) \varphi(x, s) ds \quad (1.4)$$

с функцией $\varphi(x, s)$, которая удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i \frac{\partial \varphi}{\partial s} = \mathcal{H} \varphi, \quad \mathcal{H} = -\frac{1}{2} \pi^\mu \pi_\mu. \quad (1.5)$$

Параметр s играет при этом роль времени. В [353] Фок показал, рассматривая квазиклассический предел, что параметр s совпадает с собственным временем частицы. Используя представление собственного времени, можно написать аналогичное соотношение для функции $G(x'', x')$:

$$G(x'', x') = \frac{1}{2i} \int_0^{\infty} \exp \left[-\frac{i}{2} (m^2 - i\varepsilon) s \right] g(x'', x', s) ds, \quad (1.6)$$

где ядро g является функцией Грина уравнения Шредингера

$$\left(i \frac{\partial}{\partial s} - \mathcal{H} \right) g(x'', x', s) = i \delta(s) \delta(x'' - x'). \quad (1.7)$$

Мнимая добавка к массе $-i\varepsilon$, $\varepsilon > 0$, в уравнении (1.6) означает, что $G(x'', x')$ является причинной функцией Грина и содержит состояния с положительной энергией при $t > 0$ и с отрицательной энергией при $t < 0$.

Уравнение Шредингера (1.5) в случае постоянных и однородных внешних полей E и H обладает гамильтонианом, являющимся квадратичной формой по отношению к операторам координат x^μ и импульсов p^μ . Для его исследования можно применить методы, развитые ранее (в гл. III). Для согласования с изложенной там схемой расчета введем координаты x_j ($j = 1, 2, 3, 4$) вместо x, y, z, t и соответствующие канонические импульсы $p = -i\nabla$, $p_4 = -p_0 = -i\partial/\partial t$. Электрическое поле имеет компоненты $E = (E_1, E_2, E_3)$, а магнитное поле считаем направленным вдоль оси z . Далее следуем работам [366, 356].

Гамильтониан (1.5) может быть записан в форме (4.1) гл. III. Так как в (1.5) нет линейных членов, то вектор $C = 0$, а матрица B имеет вид

$$b_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ 0 & & & -1 \end{pmatrix}; \quad b_2 = \tilde{b}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 H & 0 & 0 \\ -1/2 H & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ E_1 & E_2 & E_3 & 0 \end{pmatrix}; \quad (1.8)$$

$$b_4 = \tilde{b}_2 b_1 b_2.$$

Система уравнений (5.26) гл. III, определяющая интегралы движения, может быть легко решена. Явное выражение для матрицы Λ дается формулами

$$\lambda_1 = E_4 + \tilde{b}_2 R; \quad \lambda_2 = \tilde{b}_2 R b_1 b_2;$$

$$\lambda_3 = -b_1 R; \quad \lambda_4 = E_4 - b_1 R b_1 b_2,$$

где

$$R = W^{-1} [\exp(sW) - E_4]; \quad W = -b_1 W b_1;$$

$$W = \tilde{b}_2 - b_1 b_2 b_1 = \begin{pmatrix} 0 & -H & 0 & E_1 \\ H & 0 & 0 & E_2 \\ 0 & 0 & 0 & E_3 \\ E_1 & E_2 & E_3 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Матрица W совпадает с тензором электромагнитного поля F_{α}^{β} и не зависит от выбора калибровки. Подставляя матрицы (1.9) в формулу (5.36) гл. III, находим явное выражение для ядра $g(s)$ в координатном представлении. Это представление более удобно, чем импульсное, так как $\det \lambda_2 = 0$:

$$g(x'', x', s) = -i(2\pi)^{-2} (\det R)^{-1/2} \exp \left[\frac{i}{2} (x'' - x') R^{-1} b_1 (x'' - x') - \frac{i}{2} (x'' + x') \tilde{b}_2 b_1 (x'' - x) \right]. \quad (1.10)$$

От выбора калибровки зависит только последний член в (1.10), который не зависит от собственного времени s . Характеристическое уравнение для матрицы W

$$z^4 + z^2 (H^2 - E^2) - (EH)^2 = 0 \quad (1.11)$$

имеет два вещественных корня:

$$z_1 = -z_2 = f = 2^{-1/2} \{E^2 - H^2 + [(E^2 - H^2)^2 + 4(EH)^2]^{1/2}\}^{1/2}, \quad (1.12a)$$

и два мнимых: $z_3 = -z_4 = i\omega$, где

$$\omega = 2^{-1/2} \{H^2 - E^2 + [(E^2 - H^2)^2 + 4(EH)^2]^{1/2}\}^{1/2}. \quad (1.12b)$$

Вычисляя в явной форме экспоненту от матрицы и используя формулы работы [356], получаем

$$\begin{aligned} \exp \{Ws\} = & (\omega^2 + f^2)^{-1} [E_4(\omega^2 \operatorname{ch} fs + f^2 \cos \omega s) + W \times \\ & \times (\omega^3 \operatorname{sh} fs + f^3 \sin \omega s) |EH|^{-1} + W^2 (\operatorname{ch} fs - \cos \omega s) + W^3 \times \\ & \times (\omega \operatorname{sh} fs - f \sin \omega s) |EH|^{-1}]. \end{aligned}$$

Эта формула справедлива в случае $\det W = -(EH)^2 \neq 0$. В сингулярном случае должна быть использована другая формула. Если $EH = 0$, то уравнение (1.11), ввиду теоремы Гамильтона — Кэли [357], приводит к соотношениям $W^4 = \alpha^2 W^2$, $\alpha^2 = E^2 - H^2$. Используя их, легко получить выражение для $R(s)$:

$$R(s) = sE_4 + W\alpha^{-2} (\operatorname{ch} \alpha s - 1) + W^2 \alpha^{-3} (\operatorname{sh} \alpha s - \alpha s).$$

Мы не будем явно выписывать формулу (1.10), так как в общем случае получающееся выражение довольно громоздко. Ограничимся рассмотрением двух важных частных случаев. Пусть $EH = 0$; это условие означает, что имеются или перпендикулярные ненулевые поля, или есть только электрическое или только магнитное поле. Производя все необходимые вычисления, можно получить следующий результат [366]. Для определенности

полагаем $E_2 = E_3 = 0$, $E_1 = E$, $\alpha^2 = E^2 - H^2$:

$$g(\mathbf{r}'', t''; \mathbf{r}', t'; s) = -i\alpha \left(8s\pi^2 \operatorname{sh} \frac{\alpha s}{2}\right)^{-1} \exp \left\{ \frac{i}{2s} (z'' - z')^2 + \right. \\ \left. + \frac{i\alpha}{4} \operatorname{cth} \frac{\alpha s}{2} (x'' - x')^2 - \frac{i}{4\alpha} \operatorname{cth} \frac{\alpha s}{2} [E(t'' - t') + H(y'' - y')]^2 + \right. \\ \left. + \frac{i}{2\alpha^2 s} [E(y'' - y') + H(t'' - t')]^2 + \frac{iH}{2} (y''x' - y'x'') + \right. \\ \left. + \frac{iE}{2} (x'' + x')(t'' - t') \right\}. \quad (1.13)$$

Переходя к пределу $E = H$, получаем функцию Грина частицы в скрещенных полях $E^2 - H^2 = 0$, $\mathbf{EH} = 0$:

$$g(s) = -i(2\pi s)^{-2} \exp \left\{ \frac{i}{2s} [(x'' - x')^2 + (y'' - y')^2 + (z'' - z')^2 - (t'' - t')^2] - \right. \\ \left. - \frac{is}{24} H^2 (y'' - y' + t'' - t')^2 + \frac{iH}{2} [y''x' - y'x'' + (x'' + x')(t'' - t')] \right\}. \quad (1.14)$$

Простое выражение получается также и в другом случае, когда поля \mathbf{E} и \mathbf{H} параллельны ($E_1 = E_2 = 0$, $E_3 = E$):

$$g(s) = -i(4\pi)^{-2} EH \left(\operatorname{sh} \frac{Es}{2} \sin \frac{Hs}{2} \right)^{-1} \exp \left\{ \frac{iH}{4} \operatorname{ctg} \frac{Hs}{2} [(x'' - x')^2 + \right. \\ \left. + (y'' - y')^2] + \frac{iE}{4} \operatorname{cth} \frac{Es}{2} [(z'' - z')^2 - (t'' - t')^2] + \right. \\ \left. + \frac{iH}{2} (y''x' - y'x'') + \frac{isE}{2} (z'' + z')(t'' - t') \right\}. \quad (1.15)$$

Уравнения (1.8) и (1.14) показывают, что функция Грина уравнения Клейна — Гордона в скрещенных полях может быть выражена через функцию Грина свободной частицы:

$$G(x''_{\mu}, x'_{\mu}) = G^{(f)}(x''_{\mu}, x'_{\mu}; m^2 + \frac{1}{12} H^2 (y'' - y' + t'' - t')^2) \times \\ \times \exp \left\{ \frac{iH}{2} [y''x' - y'x'' + (x'' + x')(t'' - t')] \right\}. \quad (1.16)$$

Интеграл (1.6) легко может быть вычислен явно в случае, когда имеется только магнитное поле. Если $\mathbf{E} = 0$, то удобно сделать фурье-преобразование по переменным z и t . После этого интеграл (1.6) может быть вычислен по формуле (4.5.44) из работы [358] — при этом необходимо в интеграле (1.6) деформировать контур интегрирования так, чтобы $s \rightarrow -is'$, $s' > 0$. Функция Грина уравнения Клейна — Гордона в переменных x , y , p_z , p_0 принимает вид [366]

$$G(x'', y'', p''_z, p''_0; x', y', p_z, p_0) = -(4\pi)^{-1} \delta(p''_z - p_z) \delta(p''_0 - p_0) \times \\ \times \Gamma \left(\frac{1}{2} - \nu \right) \exp \left\{ \frac{iH}{2} (y''x' - y'x'') \right\} \rho^{-1} W_{\nu, 0}(\rho^2), \quad (1.17)$$

где $\rho^2 = 1/2 H [(x'' - x')^2 + (y'' - y')^2]$; $\nu = (p_0^2 - p_z^2 - m^2)/2H$; $W_{\nu,0}(\rho^2)$ — функция Уиттекера; $\Gamma(z)$ — гамма-функция. Аналогичное выражение для нерелятивистской функции Грина было получено в работе [359]. Как известно, полюсы функции Грина позволяют найти уровни энергии Ландау частицы в магнитном поле: $p^2 = m^2 + p_z^2 + H(2n + 1)$, $n = 0, 1, 2, \dots$

Когерентные состояния квадратичной системы были построены в явной форме в гл. III. Волновые функции $\varphi(x, s)$ когерентных состояний релятивистской частицы, отвечающие квадратичному гамильтониану (1.5), даются формулами (4.5) гл. III, в которые следует подставить значения λ_i матриц, приведенные в (1.9). Однако получение когерентных состояний уравнения Клейна — Гордона является особой задачей.

Проблема состоит в том, что волновая функция $\Psi(x)$, получаемая из $\varphi(x, s)$ согласно (1.4), будет являться решением уравнения Клейна — Гордона лишь при дополнительном условии. Именно, необходимо в (1.4) выбрать такой контур интегрирования, чтобы разность значений функции $\varphi \exp(-im^2s/2)$ на концах контура обращалась в нуль. Это возможно, вообще говоря, не всегда. Проиллюстрируем это на примере частицы, движущейся в однородном постоянном магнитном поле H . Гамильтониан (1.5) выражается в этом случае просто:

$$\mathcal{H} = Ha_1^\dagger a_1 + 1/2 (H + p_z^2 - p_0^2), \quad (1.18)$$

где оператор $a_1 = (2H)^{1/2} (\pi_x - i\pi_y)$. Операторы a_1 и $a_2 = (H/2)^{1/2} [x + H^{-1}\pi_y - i(y - H^{-1}\pi_x)]$ являются интегралами движения. Решения уравнения (1.5) можно выбрать в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{E p_z n m}(r, t, s) = \\ = \Phi_{nm}(x, y) \exp \left\{ -iEt + ip_z z - \frac{is}{2} [p_z^2 + H(2n + 1) - E^2] \right\}, \end{aligned} \quad (1.19)$$

где $\Phi_{nm}(x, y)$ — функции, описывающие движение в плоскости X, Y , — даются формулой (7.15) гл. I. Они являются собственными функциями операторов $a_1^\dagger a_1$ и $a_2^\dagger a_2$, отвечающих собственным значениям n и m соответственно. Однако волновая функция $\Psi(x)$, получающаяся при подстановке (1.19) в (1.4), не удовлетворяет уравнению Клейна — Гордона, так как указанная выше разность не обращается в нуль. Это обстоятельство становится понятным, если учесть, что параметр E в (1.19) — произвольное число, а энергия частицы в магнитном поле зависит от p_z и n . Чтобы получить решение (1.1), необходимо построить из волновых функций (1.19) волновой пакет.

Стационарные состояния (1.1) получаются из (1.19) следующим образом:

$$\begin{aligned} \Psi_{p_z^{\pm}, n, m}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pm\infty} E dE \int_{-\infty}^{\infty} ds \varphi_{E, p_z, n, m}(\mathbf{r}, t, s) e^{-im^2 s/2} = \\ &= \Phi_{nm}(x, y) \exp(i p_z z \mp i \sqrt{p_z^2 + m^2 + H(2n+1)} t). \end{aligned} \quad (1.20)$$

Энергия стационарного состояния равна $\sqrt{p_z^2 + m^2 + H(2n+1)}$, а знаки \mp отвечают, как обычно [360], волновым функциям частицы и античастицы.

Для нахождения явного вида когерентных состояний заряженной частицы в магнитном поле удобно ввести новые коммутативные операторы $\xi_3 = p_0 - p_z$ и $\eta_4 = 1/2(p_0 + p_z)$. Уравнение Клейна — Гордона (1.1) принимает вид

$$[-\xi_3 \eta_4 + 1/2(\pi_x^2 + \pi_y^2) + 1/2 m^2] \Psi = 0. \quad (1.21)$$

Оператор $\xi_3 \equiv I$ является интегралом движения. В силу этого уравнение (1.21) на пространстве собственных функций, отвечающих собственному значению оператора I , может рассматриваться как обычное уравнение Шредингера, если ввести «новое время» $s = (t - z)/I$; $\xi_3 \hat{\eta}_4 = i\partial/\partial s$. Тогда интегралы движения, порождающие когерентные состояния, таковы:

$$A_1 = \exp\{iHs\} a_1; \quad A_2 = a_2.$$

Волновые функции когерентных состояний являются собственными функциями операторов A_1 , \hat{a}_2 и \hat{I} , которые отвечают собственным значениям α_1 , α_2 , I соответственно (числа α_1 и α_2 — комплексные, а I — действительное число), и имеют простой вид:

$$\begin{aligned} \Psi_{\alpha_1 \alpha_2 I}(\mathbf{r}, t) &= (2\pi)^{-1} H^{1/2} \exp\left\{-\frac{i(H+m^2)}{2I}(t-z) - \frac{iI}{2}(t+z) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{H}{4}(x^2 + y^2) + \left(\frac{H}{2}\right)^{1/2}(x-iy)\alpha_1 \exp\left[-\frac{iH}{I}(t-z)\right] + \right. \\ &\quad \left. + \alpha_2(x+iy) - \alpha_1 \alpha_2 \exp\left[-\frac{iH}{I}(t-z)\right] - \frac{1}{2}(|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2)\right\}. \end{aligned} \quad (1.22)$$

Функции (1.22) являются производящими для стационарных состояний Ψ_{nmI} уравнения Клейна — Гордона

$$\Psi_{\alpha\beta I} = \sum_{n, m} \frac{\alpha^n \beta^m}{\sqrt{n! m!}} \Psi_{nmI}, \quad (1.23)$$

где

$$\begin{aligned} \Psi_{nmI} &= \Phi_{nm}(x, y) (2\pi)^{-1/2} \exp\left\{\frac{-iI}{2}(t+z) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{i(t-z)}{2I}[m^2 + H(2n+1)]\right\}. \end{aligned}$$

Волновая функция Ψ_{mnI} совпадает с (1.20), если учесть, что $I = p_0 - p_z$, $p_0^2 = m^2 + p_z^2 + H(2n + 1)$ (см. [366]).

Функции (1.22) и (1.23) удовлетворяют условиям нормировки

$$\langle \Psi_{nmI} | \Psi_{n'm'I'} \rangle = I \delta(I - I') \delta_{nn'} \delta_{mm'}; \quad (1.24)$$

$$\langle \Psi_{\alpha'_1 \alpha'_2 I'} | \Psi_{\alpha_1 \alpha_2 I} \rangle = I \delta(I - I') \exp [(\alpha')^* \alpha - 1/2(|\alpha'|^2 + |\alpha|^2)].$$

Скалярное произведение определяется согласно

$$\langle \Phi | \Psi \rangle \equiv \frac{i}{2} \int dx dy dz \left(\Phi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\partial \Phi^*}{\partial t} \Psi \right).$$

Функции Ψ_{mnl} с $I > 0$ описывают частицы, а с $I < 0$ — античастицы.

Ядро функции Грина $g(s)$ в представлении α_1, α_2, p_z и p_0 вычисляется с помощью решения общих соотношений (5.34) гл. III:

$$g(\alpha^*, p'_z, p'_0; \beta, p_z, p_0; s) = \delta(p'_z - p_z) \delta(p'_0 - p_0) \times \\ \times \exp \left[\frac{is}{2} (p_0^2 - p_z^2 - H) + \alpha_1^* \beta_1 e^{-iHs} + \alpha_2^* \beta_2 \right], \quad (1.25)$$

где $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2)$, $\beta = (\beta_1, \beta_2)$.

Интеграл (1.6) вычисляется посредством формулы 4.5 (36) из работы [358] и дает функцию Грина уравнения Клейна — Гордона

$$G(\alpha^*, p'_z, p'_0; \beta, p_z, p_0) = \delta(p'_0 - p_0) \delta(p'_z - p_z) (p_0^2 - p_z^2 - \\ - m^2 - H)^{-1} e^{\alpha^* \beta} \Phi(1, (2H)^{-1} (m^2 - p_0^2 + p_z^2 + 3H), -\alpha_1^* \beta_1), \quad (1.26)$$

где $\Phi(a, b, z)$ — вырожденная гипергеометрическая функция [88]. Выражение, аналогичное уравнению (1.26), может быть получено и для случая дираковской частицы.

Рассмотрим теперь представление когерентных состояний и в случае чисто электрического поля. Удобно выбрать оператор a в форме

$$a = (2E)^{-1/2} [p_z + i(p_t - Ez)]. \quad (1.27)$$

Тогда оператор Гамильтона \mathcal{H} равен

$$\mathcal{H} = 1/2 (p_x^2 + p_y^2) + 1/2 E (a^2 + a^{\dagger 2}).$$

Решая уравнения (5.34) гл. III, получаем следующее выражение для функции $g(s)$ в α, p_x, p_y, p -представлении [366]:

$$g(\alpha^*, p'_\perp, p'_t; \beta, p_\perp, p_t; s) = \\ = \delta(p'_t - p_t) \delta(p'_\perp - p_\perp) [\text{ch}(Es)]^{-1/2} \exp \{ -i 2^{-1} p_\perp^2 s - \\ - i 2^{-1} \text{th}(Es) (\alpha^{*2} + \beta^2) + \alpha^* \beta [\text{ch}(Es)]^{-1} \}, \quad (1.28)$$

где $p_\perp = (p_x, p_y)$.

Рассмотрим теперь движение частицы со спином $1/2$ во внешнем электромагнитном поле, спинорная волновая функция которой подчиняется уравнению Дирака

$$(\gamma^\mu \pi_\mu - m) u = 0. \quad (1.29)$$

Матрицы γ^μ в (1.29) удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}; \quad \gamma_\lambda^\dagger = \gamma_0 \gamma_\lambda \gamma_0.$$

Для того чтобы найти функцию Грина уравнения Дирака

$$(\gamma^\mu \pi_\mu - m) G_D(x'', x') = \delta(x'' - x'), \quad (1.30)$$

подействуем на обе части уравнения (1.30) оператором $\gamma^\mu \pi_\mu + m$. Вводя собственное время s , представим функцию Грина в виде

$$G_D(x'', x') = \frac{1}{2i} (\gamma \hat{\pi} + m) \int_0^\infty \exp\left(-\frac{i}{2} m^2 s\right) g_D(x'', x', s) ds. \quad (1.31)$$

В формуле (1.31) оператор $\gamma \hat{\pi} + m$ действует только на переменную x'' . Ядро $g_D(s)$ является временной функцией Грина уравнения Шредингера с гамильтонианом вида

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \pi^2 + \frac{i}{4} F_{\mu\nu} \sigma^{\mu\nu}, \quad (1.32)$$

где $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$; $\sigma^{\mu\nu} = 1/2 (\gamma^\mu \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu)$.

Функция Грина уравнения Шредингера может быть найдена в явном виде в случае гамильтониана, являющегося произвольной неоднородной квадратичной формой по отношению к операторам координат и импульсов. Следовательно, если внешнее поле A_μ оказывается таким, что гамильтонианы (1.32) становятся квадратичными, то и релятивистская функция Грина может быть вычислена в представлении собственного времени в явном виде.

В стационарных и однородных внешних полях функция Грина уравнения Дирака может быть выражена через ядро $g(s)$, удовлетворяющее (1.7):

$$g_D(s) = g(s) \exp\{1/4 s F_{\mu\nu} \sigma^{\mu\nu}\}. \quad (1.33)$$

В случае перпендикулярных полей $F^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} = 2H (\gamma_2 - \gamma_0) \gamma_1$, так что $(F^{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu})^2 = 0$. Окончательно функция Грина уравнения Дирака принимает вид

$$G_D(x'', x') = (\gamma \pi + m) \left(E_4 + iH (\gamma_2 - \gamma_0) \gamma_1 \frac{\partial_i}{\partial m^2} \right) G_{KG}(x'', x', m^2), \quad (1.34)$$

где функция Грина уравнения Клейна — Гордона $G_{KG}(x'', x', m^2)$ дается соотношением (1.16).

Функция Грина уравнения Дирака в постоянном магнитном поле в x, y, p_z, p_0 -представлении такова [366]:

$$G_D = - (8\pi)^{-1} \Gamma(-\nu) (\gamma\pi + m) \delta(p_z'' - p_z) \delta(p_0'' - p_0) \rho^{-1} \times \\ \times \exp \left[\frac{iH}{2} (y''x' - y'x'') \right] \{ E_4 [W_{\nu+1/2, 0}(\rho^2) - \nu W_{\nu-1/2, 0}(\rho^2)] - \\ - i\gamma^2 \gamma^1 [W_{\nu+1/2, 0}(\rho^2) + \nu W_{\nu-1/2, 0}(\rho^2)] \}, \quad (1.35)$$

где ρ^2 и ν определены в (1.17).

§ 2. Движение релятивистской заряженной частицы в суперпозиции поля плоской волны и стационарного внешнего поля

Точные функции Грина для релятивистской частицы в однородном электромагнитном поле, а также в поле плоской волны впервые были вычислены Фоком и Швингером [353, 354] (см. также [361, 362]). Решения уравнений Клейна — Гордона и Дирака для частицы в однородном магнитном поле и поле распространяющейся вдоль него плоской волны были получены Редмондом [363]. Функция Грина для этой задачи была вычислена Олейником [364], а в более общем случае, включающем еще однородное электрическое поле, параллельное магнитному (в некоторой специальной системе отсчета), — Баталиным и Фрадкиным [365]. В работах [366, 356] с использованием результатов работ [67 — 84] были рассмотрены релятивистские системы, сводящиеся к квадратичным, и для них вычислены функции Грина в более общих, чем в [361—365], случаях, а также построен пример релятивистских когерентных состояний, удовлетворяющих уравнению Клейна — Гордона. Когерентные состояния для релятивистских частиц строились на основе общих методов работ [67 — 84] с использованием формализма нулевой плоскости в работах [367]. Точные решения уравнений Клейна — Гордона и Дирака в однородном магнитном или электрическом поле и поле плоской волны, распространяющейся вдоль них, вычислялись также в работе [369].

В настоящем параграфе для внешнего поля, рассмотренного в [366, 356] (это поле будет описано ниже), построены в общем случае интегралы движения, когерентные состояния, получена функция Грина, а также вычислена поляризационная добавка к лагранжиану.

Рассмотрим, следуя [356, 366], движение заряженной частицы во внешнем поле, являющемся суперпозицией поля плоской волны с волновым вектором k^μ , четырехмерный вектор-потенциал которой обозначим $A^\mu(kx)$, и дополнительного поля, описываемого векторным потенциалом a^μ . Удобно ввести, наряду с k^μ , четырехмерные векторы $q, e^{(1)}$ и $e^{(2)}$ такие, что

$$k^2 = q^2 = ke^{(i)} = qe^{(i)} = e^{(1)}e^{(2)} = 0; \\ kq = - (e^{(i)})^2 = 1, \quad i = 1, 2, \quad (2.1a)$$

и новые координаты η_k и импульсы ξ_k ($k = 1, 2, 3, 4$):

$$\begin{aligned} \xi_{1,2} &= -e^{(1,2)}p; & \xi_3 &= kp; & \xi_4 &= kx, & x &= (x^0, x^1, x^2, x^3); \\ \eta_{1,2} &= -e^{(1,2)}x; & \eta_3 &= -qx; & \eta_4 &= qp. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Координаты η_k , и импульсы ξ_j являются каноническими и подчиняются соотношению

$$[\xi_j, \eta_k] = -i\delta_{kj}, \quad k, j = 1, 2, 3, 4.$$

Четырехмерные координаты x и импульсы p связаны с новыми переменными соотношениями

$$\begin{aligned} x &= \eta_1 e^{(1)} + \eta_2 e^{(2)} - \eta_3 k + \xi_4 q; \\ p &= \xi_1 e^{(1)} + \xi_2 e^{(2)} + \eta_4 k + \xi_3 q. \end{aligned}$$

Эти переменные были предложены Дираком [370] в координатном пространстве. В импульсном пространстве эти координаты были использованы для расчета дважды логарифмической асимптотики в [371, 372], а впоследствии — при формулировке реджеонной техники в [373].

Векторный потенциал плоской волны A^μ зависит только от ξ_4 . За счет произвола в выборе калибровки всегда можно считать, что $kA = qA = 0$. Таким образом,

$$A_\mu(\xi_4) = A_1(\xi_4) e_\mu^{(1)} + A_2(\xi_4) e_\mu^{(2)}.$$

Если A_1 или A_2 равны нулю, то волна будет линейно поляризована, в случае циркулярно поляризованной волны $|A_1| = |A_2|$.

Дополнительное поле описывается векторным потенциалом a_μ , имеющим вид

$$a_\mu = 1/2 [-\eta_2 \omega_1(\xi_4) e_\mu^{(1)} + \eta_1 \omega_2(\xi_4) e_\mu^{(2)}] + f \xi_4 q_\mu, \quad (2.2)$$

где $f = \text{const}$; ω_1 и ω_2 — произвольные функции переменной ξ_4 . Отметим, что потенциалы a^μ удовлетворяют волновому уравнению. Если ω_1 и ω_2 — константы, то a_μ является вектор-потенциалом однородного электромагнитного поля, причем k_μ — собственный вектор тензора $F_{\alpha\beta}$ этого поля, отвечающий собственному значению f . Этот случай был рассмотрен ранее с помощью других методов. Случай $\omega = \text{const}$, $f \neq 0$ был рассмотрен в [365], а случай $\omega = \text{const}$, $f = 0$ — в [364].

Можно было бы рассматривать в (2.2) вместо последнего члена $f_1 \eta_3 k_\mu + f_2 \xi_4 q_\mu$. Это сумма может быть сведена к виду $f \xi_4 q_\mu$ (2.2) с помощью калибровочного преобразования, так как f_1, f_2, f — постоянные. С помощью градиентного преобразования невозможно более упростить выражение (2.2), и в общем случае ω_1 и ω_2 являются произвольными функциями ξ_4 . Ниже будет рассмотрен случай $\omega_1 = \omega_2 = \omega(\xi_4)$. Рассмотрение общего случая не представляет никаких принципиальных затруднений, но является более громоздким [366].

Обсудим кратко свойства электромагнитного поля, описываемого потенциалом a^μ . Тензор этого поля $\mathcal{F}_{\alpha\beta}$ равен

$$\mathcal{F}_{\alpha\beta} = \omega(\xi_4) [e_\alpha^{(2)} e_\beta^{(1)} - e_\beta^{(2)} e_\alpha^{(1)}] + f(k_\alpha q_\beta - q_\alpha k_\beta) + \\ + 1/2 \omega'(\xi_4) [\eta_2 (k_\beta e_\alpha^{(1)} - k_\alpha e_\beta^{(1)}) + \eta_1 (k_\alpha e_\beta^{(2)} - k_\beta e_\alpha^{(2)})], \quad \omega' \equiv d\omega/d\xi_4.$$

Волновой вектор k^α плоской волны является собственным вектором этого тензора: $\mathcal{F}_{\alpha\beta} k^\beta = f k_\alpha$.

В специальной системе координат, где базисные векторы имеют вид

$$k = (1, 0, 0, 1); \quad q = 1/2 (1, 0, 0, -1); \\ e^{(1)} = (0, 1, 0, 0); \quad e^{(2)} = (0, 0, 1, 0),$$

электрическое \mathbf{E} и магнитное \mathbf{H} поля равны

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 1/2 y \omega' (t-z) \\ -1/2 x \omega' (t-z) \\ f \end{pmatrix}; \quad \mathbf{H} = \begin{pmatrix} 1/2 x \omega' (t-z) \\ 1/2 y \omega' (t-z) \\ \omega (t-z) \end{pmatrix}. \quad (2.3a)$$

Используя (2.3a), находим следующие выражения для инвариантов:

$$\mathbf{H}^2 - \mathbf{E}^2 = \omega^2 - f^2; \quad \mathbf{H} \cdot \mathbf{E} = \omega f, \quad (2.3b)$$

где

$$\omega = 2^{-1/2} \{ \mathbf{H}^2 - \mathbf{E}^2 + [(\mathbf{H}^2 - \mathbf{E}^2)^2 + 4(\mathbf{E} \cdot \mathbf{H})^2]^{1/2} \}^{1/2}; \\ f = 2^{-1/2} \{ \mathbf{E}^2 - \mathbf{H}^2 + [(\mathbf{E}^2 - \mathbf{H}^2)^2 + 4(\mathbf{E} \cdot \mathbf{H})^2]^{1/2} \}^{1/2}.$$

Уравнение Клейна — Гордона (1.1), описывающее движение заряженной частицы в поле с потенциалом $A^\mu + a^\mu$, после введения собственного времени s описывается гамильтонианом \mathcal{H} , который в переменных (2.1) приобретает вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{12} + \mathcal{H}_{34}, \quad (2.4)$$

где

$$\mathcal{H}_{34} = -\xi_3 \eta_4 + 1/2 f (\eta_4 \xi_4 + \xi_4 \eta_4); \\ \mathcal{H}_{12} = 1/2 [\xi_1 + 1/2 \eta_2 \omega(\xi_4) - A_1(\xi_4)]^2 + 1/2 [\xi_2 - 1/2 \eta_1 \omega(\xi_4) - \\ - A_2(\xi_4)]^2.$$

Этот гамильтониан, вообще говоря, не является квадратичным по отношению к оператору ξ_4 . Однако задача может быть сведена к квадратичному случаю. Для того чтобы показать это, рассмотрим вначале гамильтониан \mathcal{H}_{34} . Этот гамильтониан является квадратичным и может быть представлен в виде (5.22) гл. III, где полагаем вектор c равным нулю, а матрица B имеет только два ненулевых блока b_2 и $b_3 = b_2$ ($b_1 = b_4 = 0$):

$$b_2 = \left\| \begin{array}{cc} 0 & -1 \\ 0 & f \end{array} \right\|. \quad (2.5)$$

Матричные элементы $\Lambda(s)$ легко вычисляются из уравнений (5.26) гл. III:

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 - e^{fs} & e^{fs} \end{pmatrix}; \quad \lambda_4 = \tilde{\lambda}_1^{-1}; \quad \lambda_2 = \lambda_3 = 0; \quad \det \lambda_1 = e^{fs}. \quad (2.6)$$

Следовательно, система с гамильтонианом \mathcal{H}_{34} обладает следующими интегралами движения:

$$\begin{aligned} I_3 &= \xi_3; & I_4 &= \frac{1}{f} (1 - e^{fs}) \xi_3 + e^{fs} \xi_4; \\ J_3 &= \eta_3 + \frac{1}{f} (1 - e^{-fs}) \eta_4; & J_4 &= e^{-fs} \eta_4. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Поскольку оператор I_3 не зависит от собственного времени, он является интегралом движения и для уравнения Клейна — Гордона. Вторым таким геометрическим интегралом является оператор

$$J = J_4 + fJ_3 = \eta_4 + f\eta_3 = qp - fqx. \quad (2.8)$$

Аналогичные интегралы движения были найдены в [369].

Ядро функции Грина $g_{34}(s)$, отвечающей квадратичному гамильтониану \mathcal{H}_{34} , легко находится с помощью общей схемы, изложенной в гл. III, путем подстановки в общие формулы явного вида интегралов (2.7). Наиболее удобным представлением для $g_{34}(s)$ оказывается ξ -представление, в котором она принимает очень простой вид. Согласно уравнениям (5.34) гл. III находим

$$g_{34}(\xi_3, \xi_4; I_3, I_4; s) = e^{-fs/2} \delta(\xi_3 - I_3) \delta(\xi_4 - I_4 e^{-fs} - \frac{1}{f} (1 - e^{-fs}) I_3). \quad (2.9)$$

Гамильтониан \mathcal{H}_{34} имеет два интеграла движения I_3, I_4 , которые являются линейными комбинациями только операторов ξ_3 и ξ_4 . Именно это обстоятельство, которое является следствием вырождения матрицы B гамильтониана \mathcal{H}_{34} , позволяет решить задачу точно. Интегралы I_3 и I_4 оказываются интегралами движения не только системы с гамильтонианом \mathcal{H}_{34} , но также системы с полным гамильтонианом $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{12} + \mathcal{H}_{34}$, так как гамильтониан \mathcal{H}_{12} не содержит операторов η_3 и η_4 . Поскольку операторы I_3 и I_4 — интегралы движения полного уравнения (1.1), то решение этого уравнения естественно искать в том представлении, где они диагональны. Учитывая это обстоятельство, задачу можно свести к случаю нестационарного квадратичного гамильтониана, если подставить всюду в оператор \mathcal{H}_{12} вместо оператора ξ_4 его выражение через s и интегралы движения I_3 и I_4 полного гамильтониана $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{12} + \mathcal{H}_{34}$.

Обозначим через $\tilde{\mathcal{H}}_{12}$ гамильтониан, который получается из \mathcal{H}_{12} заменой оператора ξ_4 на s -числовую функцию:

$$\chi(I_3, I_4; s) = \frac{1}{f} (1 - e^{-fs}) I_3 + e^{-fs} I_4. \quad (2.10)$$

(В дальнейшем тильда над буквой всюду будет обозначать замену $\xi_1 \rightarrow \chi(s)$.) Гамильтониан $\tilde{\mathcal{H}}_{12}$ является нестационарным квадратичным гамильтонианом и допускает представление в виде формулы (5.22) гл. III.

Интегралы движения уравнения Шредингера с гамильтонианом $\tilde{\mathcal{H}}_{12}$ можно найти либо по общим формулам гл. III, либо взять непосредственно из [366, 356]:

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ J_1 \\ J_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1(s) D & -\dot{\varepsilon}_1(s) D \\ -\varepsilon_2(s) D & \dot{\varepsilon}_2(s) D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta_1^{(1)} \\ \delta_2^{(1)} \\ \delta_1^{(2)} \\ \delta_2^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (2.11a)$$

где матрица $D(s)$ равна

$$D(s) = \begin{pmatrix} \cos \Omega(s) & -\sin \Omega(s) \\ \sin \Omega(s) & \cos \Omega(s) \end{pmatrix}, \quad \Omega(s) = \frac{1}{2} \int_0^s \tilde{\omega}(\tau) d\tau, \quad (2.11b)$$

а вектор Δ

$$\Delta = \begin{pmatrix} \delta_1^{(1)} \\ \delta_2^{(1)} \\ \delta_1^{(2)} \\ \delta_2^{(2)} \end{pmatrix} = \int_0^s d\tau \begin{pmatrix} \bar{A}_2 \frac{d}{d\tau} (\varepsilon_1 \sin \Omega) - \bar{A}_1 \frac{d}{d\tau} (\varepsilon_1 \cos \Omega) \\ -\bar{A}_2 \frac{d}{d\tau} (\varepsilon_1 \cos \Omega) - \bar{A}_1 \frac{d}{d\tau} (\varepsilon_1 \sin \Omega) \\ \bar{A}_1 \frac{d}{d\tau} (\varepsilon_2 \cos \Omega) - \bar{A}_2 \frac{d}{d\tau} (\varepsilon_2 \sin \Omega) \\ \bar{A}_1 \frac{d}{d\tau} (\varepsilon_2 \sin \Omega) + \bar{A}_2 \frac{d}{d\tau} (\varepsilon_2 \cos \Omega) \end{pmatrix}. \quad (2.11b)$$

Функции $\varepsilon_1(s)$ и $\varepsilon_2(s)$ удовлетворяют осцилляторному уравнению

$$\ddot{\varepsilon} + \tilde{\omega}^2(s) \varepsilon/4 = 0 \quad (2.12a)$$

и начальным условиям

$$\varepsilon_1(0) = \dot{\varepsilon}_2(0) = 1, \quad \varepsilon_2(0) = \dot{\varepsilon}_1(0) = 0. \quad (2.12b)$$

Отметим, что интегралы (2.11a) являются каноническими переменными $[I_j, J_k] = -i\delta_{jk}$.

Зная интегралы движения, легко получить и функцию Грина гамильтониана \mathcal{H}_{12} по общим формулам (5.35) гл. III. Она имеет следующий вид:

$$g_{12}(\eta'', \eta', s) = [2\pi i \varepsilon_2(s)]^{-1} \exp \left\{ \frac{i}{2\varepsilon_2(s)} [\dot{\varepsilon}_2 \eta''^2 + \varepsilon_1 \eta'^2 - \right. \\ \left. - 2 \cos \Omega \eta'' \eta' + 2 \sin \Omega (\eta_2'' \eta_1' - \eta_2' \eta_1'')] + \frac{i}{\varepsilon_2} \eta'' D^{-1} \delta_2 - \right. \\ \left. - i \eta' \left(\delta_1 + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \delta_2 \right) + \frac{i \varepsilon_1}{2\varepsilon_2} \delta_2^2 + i \int_0^s \left[\dot{\delta}_1 \delta_2 - \frac{1}{2} (\bar{A}_1^2 + \bar{A}_2^2) \right] d\tau \right\}, \quad (2.13)$$

где η и δ_k — двумерные векторы с координатами

$$\eta \equiv \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix}; \quad \delta_k \equiv \begin{pmatrix} \delta_1^{(k)} \\ \delta_2^{(k)} \end{pmatrix}, \quad k = 1, 2.$$

Ядро функции Грина $g(s)$, отвечающей полному гамильтониану, можно представить в виде $g(s) = g_{12}(s) g_{34}(s)$, где $g_{34}(s)$ — функция Грина уравнения Шредингера с гамильтонианом \mathcal{H}_{34} , а $g_{12}(s)$ отвечает гамильтониану $\tilde{\mathcal{H}}_{12}$. Факторизованная функция $g(s) = g_{12}(s) g_{34}(s)$ удовлетворяет уравнению (1.7) с полным гамильтонианом (2.4), что легко проверяется непосредственной подстановкой $g(s)$ в уравнение (1.7). При подстановке следует учесть, что $g_{12}(s)$ не зависит явно от переменных ξ_3 и ξ_4 , а зависит как от параметров от собственных значений интегралов движения полного гамильтониана I_3 и I_4 .

Функция Грина уравнения Клейна — Гордона получается подстановкой $g(s)$ в интеграл (1.6), причем интеграл вычисляется по лучу $0 < s < \infty$, $\text{Im } s = 0$. Благодаря наличию дельта-функций этот интеграл легко берется, и в результате получается формула [356]

$$G(\eta'', \xi_3, \xi_4; \eta', I_3, I_4) = \frac{u^{-1/2} \vartheta(u^{\text{sign } f})}{2i |I_3 - f I_4|} \delta(\xi_3 - I_3) \times \\ \times g_{12}(\eta'', \eta', -\frac{1}{f} \ln u) \exp\left(\frac{im^2}{2f} \ln u\right), \quad (2.14)$$

где

$$u = \frac{I_3 - f \xi_4}{I_3 - f I_4}; \quad \vartheta = \int_0^1 \delta(x - u) dx = \begin{cases} 1, & 0 < u < 1, \\ 0, & (1/u) < 1, \\ 1/2, & u = 0, u = 1. \end{cases}$$

Таким образом, в выбранном нами представлении для функции Грина уравнения Крейна — Гордона в поле $A_{\text{ext}} = A + a$ получено замкнутое выражение, в котором уже нет невычисленных интегралов. При $f = 0$ формула (2.14) переходит в следующую:

$$G(\eta'', \xi_3, \xi_4; \eta', I_3, I_4) = \frac{1}{2i |I_3|} \Theta\left(\frac{\xi_4 - I_4}{I_3}\right) \delta(\xi_3 - I_3) \times \\ \times g_{12}\left(\eta'', \eta', \frac{\xi_4 - I_4}{I_3}\right) \exp\left(-\frac{im^2}{2} \frac{\xi_4 - I_4}{I_3}\right), \quad (2.15)$$

где

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 1/2, & x = 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Если $\xi_4 = I_4$, то $u = 1$ и (2.14) имеет вид

$$G(\eta'', \xi_3, \xi_4; \eta', I_3, \xi_4) = \frac{\delta(\xi_3 - I_3)}{4i |\xi_3 - f \xi_4|} \delta(\eta'' - \eta'), \quad (2.16)$$

так как $g_{12}(\eta'', \eta', 0) = \delta(\eta'' - \eta')$. В эту формулу не входят ни $\omega(\xi_4)$, ни $A_j(\xi_4)$, а только величина f .

Если дополнительное поле отсутствует, т. е. $\omega = f = 0$, то легко получаем простое выражение для функции Грина заряженной частицы в поле плоской волны. Для ядра $g(s)$ получаем

$$g(\xi'', \xi', s) = \prod_{k=1}^3 \delta(\xi_k'' - \xi_k') \delta(\xi_4'' - \xi_3' s - \xi_4') \exp \left\{ -\frac{is}{2} (\xi_1'^2 + \xi_2'^2) + \right. \\ \left. + \frac{i}{\xi_3'} \int_{\xi_4'}^{\xi_4''} [\xi_1' A_1(\tau) + \xi_2' A_2(\tau) - \frac{1}{2} (A_1^2 + A_2^2)] d\tau \right\}. \quad (2.17)$$

Отметим, что аргумент экспоненты в (2.17) тесно связан с классическим действием для заряда в поле плоской волны [374]. Это характерное свойство квадратичных систем.

Интеграл (1.6) при подстановке в него (2.17) тривиально вычисляется. Функция Грина уравнения Клейна — Гордона заряженной частицы в поле плоской волны имеет вид

$$G(x'', x') = \frac{\theta\left(\frac{\xi_4'' - \xi_4'}{\xi_3'}\right)}{2i|\xi_3'|} \exp \left\{ \frac{i}{2} (\xi_1'^2 + \xi_2'^2 + m^2) \left(\frac{\xi_4'' - \xi_4'}{\xi_3'} \right) + \right. \\ \left. + \frac{i}{\xi_3'} \int_{\xi_4'}^{\xi_4''} \left[\xi_1' A_1^2(\tau) + \xi_2' A_2^2(\tau) - \frac{1}{2} (A_1^2(\tau) + A_2^2(\tau)) \right] d\tau \right\}. \quad (2.18)$$

Найденные выше явные выражения для функций Грина уравнения Клейна — Гордона позволяют вычислить поправку к лагранжиану электромагнитного поля, вызванную взаимодействием с электрон-позитронным вакуумом. Согласно Швингеру [354], поправка к лагранжиану равна $(x - \text{четырёхмерный координатный вектор})$

$$L^{(1)}(x) = -i \int_0^\infty \frac{ds}{s} g(x, x, s) e^{-im^2 s/2}, \quad (2.19)$$

где $g(x, x, s)$ — диагональный элемент функции Грина уравнения (1.5) в координатном представлении. Для его вычисления следует проделать преобразование Фурье функции $g(\eta'', \xi_3, \xi_4; \eta', I_3, \xi_4, s)$ по ξ_3 и I_3 . В результате функция $g_{34}(s)$ перейдет в $f [4\pi sh(fs/2)]^{-1} \exp[if\xi_4(\eta_3'' - \eta_3')]$. В функции $g_{12}(s)$, параметрически зависящей от I_3 и I_4 , следует положить $I_3 = f\xi_4 = fI_4$. Тогда функция $\chi(\tau) = \xi_4$, т. е. не зависит от собственного времени. Поэтому при вычислении диагональных элементов функции Грина следует считать функции ω, A_1, A_2 не зависящими от s и τ ,

а равными просто их значениям в точке ξ_4 . Этот вывод сохраняется, очевидно, даже если функции $\omega_1(\xi_4)$ и $\omega_2(\xi_4)$ различны: в диагональные элементы нужно подставить $\omega(\xi_4) = 1/2 [\omega_1(\xi_4) + \omega_2(\xi_4)]$. При $\tilde{\omega}(s) = \text{const}$ функции ε_1 и ε_2 равны

$$\varepsilon_1(s) = \cos \frac{\omega s}{2}; \quad \varepsilon_2(s) = \frac{2}{\omega} \sin \frac{\omega s}{2}. \quad (2.20)$$

Учитывая эти соотношения, а также считая A_j не зависящими от s , нетрудно убедиться, что величины A_j в формулу для диагональных элементов $g(s)$ не входят (заметим, что для исчезновения A_j из (2.13) при $\eta'' = \eta'$ достаточно условий $A_j = \text{const}$ и тождества $\varepsilon_2 \varepsilon_1 - \varepsilon_2 \dot{\varepsilon}_1 = 1$, которое является следствием уравнений (2.12) при любых $\tilde{\omega}(s)$; явный вид функций $\varepsilon_{1,2}(s)$ при этом не важен). Окончательно находим [356]

$$g(\eta_1, \eta_2, \eta_3, \xi_4; \eta_1, \eta_2, \eta_3, \xi_4; s) = f \omega(\xi_4) \{ (4\pi)^2 i \sin [1/2 \omega(\xi_4) s] \text{sh}(1/2 f s) \}^{-1}. \quad (2.21)$$

Таким образом, плоская волна не вызывает дополнительной поляризации вакуума по сравнению с полем $\mathcal{F}_{\alpha\beta}$ (2.2), что объясняется тем, что оба инварианта, $H^2 - E^2$ и HE , одинаковы как для поля $\mathcal{F}_{\alpha\beta}$, так и для полного поля, включающего плоскую волну. Впервые этот результат в случае $\omega = f = 0$ был получен Швингером [354], при $\omega = f = \text{const}$ — Баталиным и Фрадкиным [365] и при $\omega = 0, f = \text{const}$ — Нарожным и Никишовым [369].

Для построения когерентных состояний, согласно изложенному выше (см. гл. III), введем вместо интегралов движения (2.11а) их линейные комбинации:

$$B(s) = \sqrt{\omega_0/2} [1/2 J_1 + I_2/\omega_0 - i(1/2 J_2 - I_1/\omega_0)] = \\ = 1/2 e^{-i\Omega(s)} [\varepsilon(s)(\xi_2 + i\xi_1) - \dot{\varepsilon}(s)(\eta_2 + i\eta_1)] + \delta_B \quad (2.22)$$

и

$$A(s) = \sqrt{\omega_0/2} [1/2 J_1 - I_2/\omega_0 + i(1/2 J_2 + I_1/\omega_0)] = \\ = 1/2 e^{i\Omega(s)} [\varepsilon(s)(i\xi_1 - \xi_2) + \dot{\varepsilon}(s)(\eta_2 - i\eta_1)] + \delta_A, \quad (2.23)$$

где

$$\delta_B = -\frac{1}{2} \int_0^s (\bar{A}_2(\tau) + i\bar{A}_1(\tau)) \frac{d}{d\tau} (\varepsilon(\tau) e^{-i\Omega(\tau)}) d\tau; \\ \delta_A = \frac{1}{2} \int_0^s (\bar{A}_2(\tau) - i\bar{A}_1(\tau)) \frac{d}{d\tau} (\varepsilon(\tau) e^{i\Omega(\tau)}) d\tau; \quad (2.24) \\ \varepsilon(s) = \sqrt{2/\omega_0} \varepsilon_1 + i \sqrt{\omega_0/2} \varepsilon_2; \quad \dot{\varepsilon} \varepsilon^* - \varepsilon^* \dot{\varepsilon} = 2i;$$

ω_0 — значение функции $\tilde{\omega}(s)$ при $s = 0$. При $\omega = \text{const}$ $\varepsilon(s) = \sqrt{2/\omega} \exp(i\omega s/2)$. Нижний предел в интегралах для δ_A и δ_B может быть произвольным.

Операторы A и B удовлетворяют соотношениям

$$[A, A^\dagger] = [B, B^\dagger] = 1; \quad [A, B] = [A, B^\dagger] = 0. \quad (2.25)$$

Собственные функции $\varphi_{\alpha\beta}(s)$ интегралов движения A и B , удовлетворяющие уравнению Шредингера с гамильтонианом \mathcal{H}_{12} , являются когерентными состояниями в собственном времени. Явный вид нормированных состояний $\varphi_{\alpha\beta}$ следующий:

$$\begin{aligned} \varphi_{\alpha\beta}(\eta_1, \eta_2, s) = & (\pi\epsilon^2)^{-1/2} \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{2\epsilon} |z|^2 + \frac{1}{\epsilon} \left[e^{-i\Omega z^*} (\alpha - \delta_A) + \right. \right. \\ & \left. \left. + e^{i\Omega z} (\beta - \delta_B) \right] - \frac{\epsilon^*}{\epsilon} (\alpha - \delta_A) (\beta - \delta_B) + \alpha\delta_A^* + \beta\delta_B^* - \right. \\ & \left. - i \int_0^s \left[\text{Im} (\delta_A \delta_A^* + \delta_B \delta_B^*) + \frac{1}{2} (\bar{A}_1^2 + \bar{A}_2^2) \right] d\tau - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\delta_A|^2 + |\delta_B|^2) \right\}, \quad (2.26) \end{aligned}$$

где $z = \eta_1 + i\eta_2$; α и β — собственные числа $A(s)$ и $B(s)$ соответственно. Если $\omega = \text{const}$, то эта формула упрощается ($\delta_B = 0$):

$$\begin{aligned} \varphi_{\alpha\beta}(\eta_1, \eta_2, s) = & \left(\frac{\omega}{2\pi} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{i\omega s}{2} - \frac{\omega}{4} |z|^2 + \sqrt{\frac{\omega}{2}} \times \right. \\ & \times \left[e^{-i\omega s} z^* (\alpha - \delta_A) + \beta z \right] - \beta e^{-i\omega s} (\alpha - \delta_A) + \alpha\delta_A^* - \\ & \left. - i \int_0^s \left[\text{Im} (\delta_A \delta_A^*) + \frac{1}{2} (\bar{A}_1^2 + \bar{A}_2^2) \right] d\tau - \frac{1}{2} (|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\delta_A|^2) \right\}, \quad (2.27) \end{aligned}$$

где

$$\delta_A = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \int_0^s e^{i\omega\tau} (\bar{A}_1(\tau) + i\bar{A}_2(\tau)) d\tau.$$

Решение полного уравнения (1.5) равно $\varphi(s) = g_{34}(s) \varphi_{\alpha\beta}(s)$. Чтобы получить решение уравнения Клейна — Гордона, нужно подставить $\varphi(s)$ в интеграл (1.4) и выбрать такой контур интегрирования, чтобы разность значений функции $\varphi(s) \exp(-im^2s/2)$ на концах контура обращалась в нуль.¹

В случае функции $\varphi(s)$, определяемой формулами (2.9), (2.26), (2.27), ситуация проще: при $s = -\infty$ функция $g_{34}(s)$ равна нулю из-за наличия дельта-функции, а $g_{34}(+\infty) = 0$ благодаря множителю $e^{-fs/2}$ (при $f > 0$; при $f < 0$ — наоборот). Поэтому интеграл (1.4) можно вычислять вдоль вещественной оси от $-\infty$ до $+\infty$. В результате имеем следующее решение уравнения Клейна — Гордона (по ξ_3 проделано преобразование Фурье, чтобы получить решение в координатном представлении) [356]:

$$\begin{aligned} \Psi_{I_3, \alpha\beta}(\eta_1, \eta_2, \eta_3, \xi_4) = & \frac{(2\pi u)^{-1/2}}{[I_3 - fI_4]} \Theta(u) \exp \left(i\eta_3 I_3 + \frac{im^2}{2f} \ln u \right) \times \\ & \times \varphi_{\alpha\beta} \left(\eta_1, \eta_2; -\frac{1}{f} \ln u \right). \quad (2.28) \end{aligned}$$

Это решение уравнения Клейна — Гордона является собственной функцией операторов I_3 , A_0 и B_0 с собственными значениями I_3 , α , β , причем A_0 и B_0 получаются из $A(s)$ и $B(s)$ (2.23), (2.22) заменой параметра s оператором $(-1/f) \ln u$ (ξ_4, I_3, I_4). Операторы A_0 и B_0 удовлетворяют соотношениям (2.25) при условии $u > 0$. Поэтому функция (2.28) является когерентным состоянием и обладает всеми его свойствами. Когерентные состояния для уравнений Клейна — Гордона и Дирака строились также (при $\omega = \text{const}$) в работах [366 — 368]. Полученные в них результаты сводятся к (2.28).

Фактически формула (2.28) является частным случаем общей формулы для когерентных состояний квадратичных систем, найденной ранее в работах [84, 104], и получается путем подстановки в общую формулу конкретных значений матриц и векторов, определяющих интегралы движения (2.22), (2.23). В случае $f = 0$ формула (2.28) переходит в следующую:

$$\begin{aligned} \Psi_{I_3\alpha\beta}(\eta_1, \eta_2, \eta_3, \xi_4) = \\ = \frac{(2\pi)^{-1/2}}{|I_3|} \exp\left(i\eta_3 I_3 - \frac{im^2}{2} \frac{\xi_4 - I_4}{I_3}\right) \Phi_{\alpha\beta}\left(\eta_1, \eta_2, \frac{\xi_4 - I_4}{I_3}\right). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Параметр I_4 соответствует произволу в выборе начала отсчета координат. Решения, отвечающие $I_3 > 0$, описывают частицы, а решения с $I_3 < 0$ — античастицы.

Матричные элементы представлений групп динамической симметрии

§ 1. Матричные элементы преобразования Боголюбова и переходы между уровнями Ландау в нестационарном магнитном поле

Для диагонализации гамильтониана \mathcal{H} вида [375]

$$\mathcal{H} = \frac{UN^2}{2V} + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \left[\left(\frac{k^2}{2m} + \frac{UN}{V} \right) (a_k^\dagger a_k + a_{-k}^\dagger a_{-k}) + \frac{UN}{V} (a_k^\dagger a_{-k}^\dagger + a_k a_{-k}) \right]$$

Боголюбов [376] и Валатин [377] рассмотрели каноническое преобразование Бозе операторов рождения и уничтожения a_k^\dagger , a_k , удовлетворяющих стандартным коммутационным соотношениям

$$[a_k, a_{k'}] = 0; \quad [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger] = 0; \quad [a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{k, k'},$$

вида

$$\begin{aligned} b_k &= u_k a_k + v_k a_{-k}^\dagger; & u_k^2 - v_k^2 &= 1; & u_k &= u_{-k}; & v_k &= v_{-k}; \\ b_k^\dagger &= u_k a_k^\dagger + v_k a_{-k}; & u_k &= \operatorname{ch} \tau_k; & v_k &= \operatorname{sh} \tau_k, \end{aligned} \quad (1.1)$$

где параметр τ_k выбирается из условия диагонализации гамильтониана \mathcal{H} [375, 378].

Наборы фоковских состояний

$$|n_1, n_2\rangle_a = (n_1! n_2!)^{-1/2} (a_k^\dagger)^{n_1} (a_{-k}^\dagger)^{n_2} |0, 0\rangle_a$$

и

$$|m_1, m_2\rangle_b = (m_1! m_2!)^{-1/2} (b_k^\dagger)^{m_1} (b_{-k}^\dagger)^{m_2} |0, 0\rangle_b$$

связаны между собой оператором $S = \exp[\tau_k (a_k a_{-k} - a_k^\dagger a_{-k}^\dagger)]:$

$$|m_1, m_2\rangle_b = S |n_1, n_2\rangle_a, \quad (1.2)$$

матричные элементы которого обозначим как

$$S_{m_1, m_2; n_1, n_2} = {}_b \langle m_1, m_2 | n_1, n_2 \rangle_a = {}_a \langle m_1, m_2 | S^\dagger | n_1, n_2 \rangle_a. \quad (1.3)$$

Соотношения (1.2), (1.3) вытекают из

$$b_k = S a_k S^\dagger; \quad b_k^\dagger = S a_k^\dagger S^\dagger. \quad (1.4)$$

Отметим, что в задаче о движении заряженной частицы в переменном по времени магнитном поле [71, 72] оператор эволюции является, по существу, преобразованием Боголюбова, что позволяет использовать применявшийся в [71] метод когерентных состояний [61] для вычисления производящей функции и матричных элементов преобразования Боголюбова. Далее следуем [381].

Введем когерентные состояния, следуя [68, 381], для операторов a_k , a_{-k} , b_k и b_{-k} при $k \neq 0$:

$$\begin{aligned} a_k | \alpha_1, \alpha_2 \rangle_a &= \alpha_1 | \alpha_1, \alpha_2 \rangle_a; & b_k | \beta_1, \beta_2 \rangle_b &= \beta_1 | \beta_1, \beta_2 \rangle_b; \\ a_{-k} | \alpha_1, \alpha_2 \rangle_a &= \alpha_2 | \alpha_1, \alpha_2 \rangle_a; & b_{-k} | \beta_1, \beta_2 \rangle_b &= \beta_2 | \beta_1, \beta_2 \rangle_b. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Наличие когерентных состояний позволяет ввести производящую функцию для матричных элементов (1.3):

$$\begin{aligned} \exp(1/2 | \alpha_1 |^2 + | \alpha_2 |^2 + | \beta_1 |^2 + | \beta_2 |^2) {}_b \langle \beta_1, \beta_2 | \alpha_1, \alpha_2 \rangle_a &= \\ = \sum_{n_1, n_2; m_1, m_2} \frac{\alpha_1^{n_1} \alpha_2^{n_2} \beta_1^{* m_1} \beta_2^{* m_2}}{(n_1! n_2! m_1! m_2!)^{1/2}} S_{m_1, m_2; n_1, n_2}. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Легко вычислить, используя результаты работы [71] (см. также [380]), производящую функцию (1.6); имеем

$$\begin{aligned} \exp(1/2 | \alpha_1 |^2 + | \alpha_2 |^2 + | \beta_1 |^2 + | \beta_2 |^2) {}_b \langle \beta_1, \beta_2 | \alpha_1, \alpha_2 \rangle_a &= \\ = (1/u_k) \exp(v_k \beta_1 \beta_2 - u_k \alpha_1 \alpha_2 + \alpha_2 \beta_2 + \alpha_1 \beta_1). \end{aligned} \quad (1.7)$$

Разложение (1.7) в ряд Тейлора позволяет пойти, используя (1.3) и (1.5), матричные элементы оператора S :

$$\begin{aligned} S_{m_1, m_2; n_1, n_2} &= \\ = \frac{1}{u_k} \delta_{m_2 - m_1; n_2 - n_1} \begin{cases} D_{m, m'}^j(\cos \theta) & \text{при } m_i > n_i \text{ и } m_1 > m_2, \\ (-1)^{m - m'} D_{m, m'}^j(\cos \theta) & \text{при } m_i < n_i \text{ и } m_1 > m_2, \end{cases} \end{aligned} \quad (1.8)$$

где $\cos \theta = 1 - 2u^2/v^2$, $j = 1/2(m_1 + n_2)$, $m = 1/2(n_1 - m_2)$, $m' = 1/2(m_1 - n_2)$, а $D_{m, m'}^j(\cos \theta)$ -функция определена согласно работе [388]. Случай $m_2 > m_1$ получается из (1.8) заменой $n_1 \rightleftharpoons n_2$, $m_1 \rightleftharpoons m_2$.

Матричные элементы преобразования Боголюбова с $k = 0$ приведены в [85, 186], а также в работе [379].

Заметим, что в случае общего линейного канонического преобразования $b_i = \sum_{k=1}^n u_{ik} a_k + v_{ik} a_k^\dagger + \lambda_i$, где u_{ik} , v_{ik} , λ_i — комплексные числа, соответствующий матричный элемент оператора преобразования можно явно выразить, используя результат работы [43], через полином Эрмита от n переменных.

§ 2. Когерентные состояния симметричного волчка

Различные авторы [382—385] вводили когерентные состояния для симметричного волчка разными способами. В частности, когерентные состояния можно понимать как состояния, в которых задана начальная точка траектории волчка в фазовом пространстве средних обобщенных координат и импульсов. Можно, однако, воспользоваться еще одним важным свойством когерентных состояний, а именно тем, что они задают производящую функцию для таких состояний квантовых систем, которые характеризуются дискретными квантовыми числами. В частности, если известны амплитуды переходов между когерентными состояниями

$$\langle \alpha_1, \dots, \alpha_n | \beta_1, \dots, \beta_n \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle,$$

то можно определить аналоги когерентных состояний для квантовых систем, чьи волновые функции суть матричные элементы представлений группы G , следующей формулой: $\langle g | \alpha, \beta \rangle = \langle \alpha | \beta_g \rangle$. Здесь β_g есть вектор, полученный действием преобразования g , принадлежащего группе G , на вектор β : $\beta_g = g\beta$, т. е. совокупность $\{\beta_g, g \in G\}$ представляет собой некоторую орбиту [202—204]. Следуя вышеуказанной конструкции, мы построим волновые пакеты, являющиеся аналогами когерентных состояний для симметричного волчка. Используя их, найдем новые производящие функции для d -функции. Следующие из них интегральные представления d -функции будут использованы для нахождения асимптотических выражений в области больших квантовых чисел.

Гамильтониан асимметричного волчка с моментами инерции I_1 , I_2 и I_3 имеет вид

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{J_1^2}{I_1} + \frac{J_2^2}{I_2} + \frac{J_3^2}{I_3} \right), \quad (2.1)$$

где J_i — операторы углового момента — генераторы алгебры Ли группы $O(3)$. Если все моменты инерции $I_i = I$ одинаковы, то волчок является сферически-симметричным и гамильтониан \mathcal{H} в этом случае пропорционален оператору квадрата момента J^2 , который является оператором Казимира группы вращений $O(3)$. Волновые функции Ψ стационарных состояний симметричного волчка, отвечающие энергии $E_J = \hbar^2 J(J+1)/2I$, связаны с матричными элементами неприводимого представления группы $O(3)$

с моментом J . Как известно [386, 387], в представлении углов Эйлера $\varphi_1, \theta, \varphi_2$ волновые функции стационарных состояний можно записать в виде $\Psi(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = \exp[-i(m\varphi_1 + m'\varphi_2)]\psi$, причем ψ удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\frac{d}{dz} \left[(1-z^2) \frac{d}{dz} \right] \psi + \left[j(j+1) - \frac{m^2 - 2mm'z + m'^2}{1-z^2} \right] \psi = 0, \quad (2.2)$$

где $z = \cos \theta$. Решение уравнения (2.2) можно выразить через d -функцию Вигнера [320, 388], являющуюся матричным элементом неприводимого представления группы вращений $O(3)$:

$$d_{m,m'}^j(\theta) = \langle j, m | e^{-i\theta J_y} | j, m' \rangle.$$

Состояния волчка $|j, m, m'\rangle$, отвечающие квантовым числам j, m, m' , выбираем ортонормированными:

$$\langle j_2, m_2, m'_2 | j_1, m_1, m'_1 \rangle = \delta_{j_2 j_1} \delta_{m_2 m_1} \delta_{m'_2 m'_1}. \quad (2.3)$$

В представлении углов Эйлера эти состояния связаны с D -функцией:

$$\langle \varphi_1, \theta, \varphi_2 | j, m, m' \rangle = \frac{1}{N_j} D_{m,m'}^j(\varphi_1, \theta, \varphi_2), \quad (2.4)$$

где $D_{m,m'}^j(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = e^{-im\varphi_1} d_{m,m'}^j(\theta) e^{-im'\varphi_2}$; $N_j = 8\pi^2/(2j+1)$.

Рассмотрим волновые пакеты $|\alpha\rangle$, являющиеся суперпозицией стационарных состояний $|j, m, m'\rangle$, вида

$$|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^*\alpha\right) \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m,m'=-j}^j C_j N_j \times \\ \times \frac{\alpha_1^{j+m} \alpha_2^{j-m} \alpha_3^{j+m'} \alpha_4^{j-m'}}{\sqrt{(j-m)!(j+m)!(j-m')!(j+m')!}} |j, m, m'\rangle, \quad (2.5)$$

где $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$ — произвольные комплексные числа, а коэффициенты C_j можно выбирать различным образом. Волновые пакеты типа (2.5) с $C_j \equiv 1, j = 0, 1/2, 1, \dots$, встречаются при рассмотрении задачи о движении заряженной частицы в переменном магнитном поле (см. § 4 гл. II). Если коэффициенты C_j выбрать равными $\sqrt{(2j)!}$, то волновые пакеты (2.5) будут аналогичны когерентным состояниям асимметричного волчка [389].

Характерно, что средние значения $\langle \alpha | J_i(t) | \alpha \rangle = J_i$ гейзенберговских операторов $J_i(t)$, вычисленные с помощью когерентных состояний асимметричного волчка, определенных так, как показано в [389], удовлетворяют классическим уравнениям Эйлера [390] вида

$$\begin{aligned} \dot{J}_1 + (I_3 - I_2) \Omega_2 \Omega_3 &= 0; \\ \dot{J}_2 + (I_1 - I_3) \Omega_3 \Omega_1 &= 0; \\ \dot{J}_3 + (I_2 - I_1) \Omega_1 \Omega_2 &= 0, \end{aligned} \quad (2.6)$$

где $\Omega(t) = J_j(t)/I_j$ ($j = 1, 2, 3$).

Далее будем рассматривать (следуя [392]) только когерентные состояния $|\alpha\rangle$ (2.5) с $C_j \equiv 1$. В представлении углов Эйлера когерентное состояние (2.5) имеет вид

$$\langle \varphi_1, \theta, \varphi_2 | \alpha \rangle = \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^* \alpha\right) \exp\left[\left(\alpha_3 \alpha_4\right) u\left(\begin{matrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{matrix}\right)\right], \quad (2.7)$$

где u — унитарная матрица 2-го порядка — является представлением $D^{1/2}$ группы вращений $O(3) \approx SU(2)$:

$$u = \begin{vmatrix} e^{i\frac{\varphi_1}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\varphi_1}{2}} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \\ -\sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} e^{i\frac{\varphi_2}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\varphi_2}{2}} \end{vmatrix}. \quad (2.8)$$

Формула (2.7) с учетом (2.5) задает производящую функцию, введенную Швингером [393], для D -функций (2.4):

$$\langle \varphi_1, \theta, \varphi_2 | \alpha \rangle = \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^* \alpha\right) \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m, m'=-j}^j D_{m, m'}^j(\varphi_1, \theta, \varphi_2) \times \\ \times \frac{\alpha_1^{j+m} \alpha_2^{j-m} \alpha_3^{j+m'} \alpha_4^{j-m'}}{\sqrt{(j-m)!(j+m)!(j-m')!(j+m')!}},$$

причем

$$D_{m, m'}^j(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = N_j \langle \varphi_1, \theta, \varphi_2 | j, m, m' \rangle.$$

Волновой пакет типа (2.5) возникает также при рассмотрении движения заряда в электромагнитном поле [71].

Используя (2.5) и (2.4), легко найти закон преобразования когерентных состояний при вращениях, т. е. при действии на них оператора правого сдвига на группе $SU(2)$:

$$T_{(\varphi_1, \theta, \varphi_2)} = \exp(i\varphi_2 J_3) \exp(i\theta J_1) \exp(i\varphi_1 J_3). \quad (2.9)$$

Записывая вращение $(\varphi_1, \theta, \varphi_2)$ с помощью параметров Кэли — Клейна $(\alpha, \beta, \gamma, \delta)$:

$$\alpha = \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}}; \quad \gamma = i \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}}; \\ \beta = i \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi_2 - \varphi_1}{2}}; \quad \delta = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}},$$

находим

$$T_{(\alpha, \beta, \gamma, \delta)} |\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4\rangle = |\alpha\alpha_1 - i\beta\alpha_2, i\gamma\alpha_1 + \delta\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4\rangle. \quad (2.10a)$$

Аналогичным образом находим для левого сдвига T на группе $SU(2)$

$$T_{(\alpha, \beta, \gamma, \delta)} |\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4\rangle = |\alpha_1, \alpha_2, \delta\alpha_3 - i\gamma\alpha_4, i\beta\alpha_3 + \alpha\alpha_4\rangle, \quad (2.10b)$$

где $T = \exp\{i\varphi_2 J_3\} \exp\{i\theta J_1\} \exp\{i\varphi_1 J_3\}$.

Отметим, что законы преобразования (2.10а) и (2.10б) когерентных состояний $|\alpha\rangle$ (2.5) при конечных вращениях остаются справедливыми при любом выборе коэффициентов $\{C_j\}$.

Инфинитезимальные операторы левых и правых сдвигов, отвечающие операторам углового момента в подвижной и неподвижной по отношению к волчку системах, в $|\alpha\rangle$ -представлении имеют вид

$$\begin{aligned} J_1 &= \frac{1}{2} (\alpha_2 \frac{\partial}{\partial \alpha_1} + \alpha_1 \frac{\partial}{\partial \alpha_2}); & J_2 &= \frac{i}{2} (-\alpha_2 \frac{\partial}{\partial \alpha_1} + \alpha_1 \frac{\partial}{\partial \alpha_2}); \\ J_3 &= \frac{1}{2} (-\alpha_1 \frac{\partial}{\partial \alpha_1} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial \alpha_2}); \\ \mathcal{J}_1 &= \frac{1}{2} (\alpha_4 \frac{\partial}{\partial \alpha_3} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial \alpha_4}); & \mathcal{J}_2 &= \frac{i}{2} (\alpha_4 \frac{\partial}{\partial \alpha_3} - \alpha_3 \frac{\partial}{\partial \alpha_4}); \\ \mathcal{J}_3 &= \frac{1}{2} (-\alpha_3 \frac{\partial}{\partial \alpha_3} + \alpha_4 \frac{\partial}{\partial \alpha_4}). \end{aligned}$$

Операторы J_i и \mathcal{J}_i подчиняются коммутационным соотношениям

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk} J_k; \quad [\mathcal{J}_i, \mathcal{J}_j] = -i\epsilon_{ijk} \mathcal{J}_k; \quad [J_i, \mathcal{J}_j] = 0.$$

Средние значения этих операторов, вычисленные с помощью когерентных состояний (2.5), даются выражениями [392]

$$\begin{aligned} J_1 &= -(\alpha_1 \alpha_2^* + \alpha_1^* \alpha_2) \left[\frac{|\alpha_3|^2 + |\alpha_4|^2}{|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2} \right]^{1/2} \frac{J_2(2\lambda)}{I_1(2\lambda)}; \\ J_2 &= -i(\alpha_1 \alpha_2^* - \alpha_1^* \alpha_2) \left[\frac{|\alpha_3|^2 + |\alpha_4|^2}{|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2} \right]^{1/2} \frac{I_2(2\lambda)}{I_1(2\lambda)}; \\ J_3 &= (|\alpha_1|^2 - |\alpha_2|^2) \left[\frac{|\alpha_3|^2 + |\alpha_4|^2}{|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2} \right]^{1/2} \frac{I_2(2\lambda)}{I_1(2\lambda)}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

где $J_i = \langle \alpha | J_i | \alpha \rangle$, а I_1 и I_2 — модифицированные функции Бесселя.

Аналогичные выражения для $\langle \alpha | \mathcal{J}_i | \alpha \rangle$ получаем из (2.11) с помощью замены $\alpha_1 \rightarrow \alpha_3$, $\alpha_2 \rightarrow \alpha_4$.

При больших значениях α , $|\alpha| \gg 1$, т. е. в классическом пределе, используя асимптотику функции Бесселя [88], находим

$$\begin{aligned} J_{1\text{кл}} &\approx -\frac{1}{2} (\alpha_1 \alpha_2^* + \alpha_1^* \alpha_2) \left[\frac{|\alpha_3|^2 + |\alpha_4|^2}{|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2} \right]^{1/2}; \\ J_{2\text{кл}} &\approx -\frac{i}{2} (\alpha_1 \alpha_2^* - \alpha_1^* \alpha_2) \left[\frac{|\alpha_3|^2 + |\alpha_4|^2}{|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2} \right]^{1/2}; \\ J_{3\text{кл}} &\approx \frac{1}{2} (|\alpha_1|^2 - |\alpha_2|^2) \left[\frac{|\alpha_3|^2 + |\alpha_4|^2}{|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2} \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (2.12)$$

и аналогичным образом для $\langle \alpha | \mathcal{J} | \alpha \rangle$.

Скалярное произведение когерентных состояний (2.5) с $C_j \equiv 1$ выражается через функцию Бесселя мнимого аргумента

$$\langle \beta | \alpha \rangle = 8\pi^2 \exp\left(-\frac{\alpha^* \alpha + \beta^* \beta}{2}\right) \frac{I_1(2\lambda)}{\lambda}, \quad (2.13)$$

где

$$\lambda = [(\beta_1^* \alpha_1 + \beta_2^* \alpha_2) (\beta_3^* \alpha_3 + \beta_4^* \alpha_4)]^{1/2}. \quad (2.14)$$

Выражение (2.13) показывает, что когерентные состояния (2.5) не ортогональны, хотя и образуют полную систему.

Волновой функции $\langle \varphi_1, \theta, \varphi_2 | f \rangle$, отвечающей состоянию $|f\rangle$ в представлении углов Эйлера, в представлении когерентных состояний отвечает амплитуда

$$\langle \alpha | f \rangle = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \langle \alpha | \varphi_1, \theta, \varphi_2 \rangle \langle \varphi_1, \theta, \varphi_2 | f \rangle d\varphi_1 \sin \theta d\theta d\varphi_2, \quad (2.15)$$

где $\langle \alpha | \varphi_1, \theta, \varphi_2 \rangle$ дается (2.7). Преобразование (2.15) отображает пространство состояний волчка, т. е. гильбертово пространство L^2 функций на группе $SU(2)$ $f(\varphi_1, \theta, \varphi_2)$, интегрируемых с квадратом: $\|f\|^2 = \iiint |f^*(\varphi_1, \theta, \varphi_2)|^2 d\varphi_1 \sin \theta d\theta d\varphi_2$, в пространство \mathcal{F} аналитических функций $F(\alpha)$ от четырех комплексных переменных α_i : $F(\alpha) = \exp\{1/2 |\alpha|^2\} \langle \alpha | f \rangle$, интегрируемых с квадратом с весом $e^{-|\alpha|^2}$, которое рассматривалось Баргманом [64].

Обозначим образ L^2 в \mathcal{F} через $\tilde{\mathcal{F}}$. Тогда $\tilde{\mathcal{F}}$ получается из \mathcal{F} с помощью оператора проектирования P вида

$$PF(\alpha) = \int F\left(\alpha_1 e^{-i\frac{\psi}{2}}, \alpha_2 e^{-i\frac{\psi}{2}}, \alpha_3 e^{i\frac{\psi}{2}}, \alpha_4 e^{i\frac{\psi}{2}}\right) \frac{d\psi}{2\pi}. \quad (2.16)$$

В этом случае преобразование (2.15) имеет единственный образ в $\tilde{\mathcal{F}}$. По образу $F(\alpha)$ такому, что $PF(\alpha) = F(\alpha)$, находим состояние волчка:

$$\langle \varphi_1, \theta, \varphi_2 | f \rangle = \frac{1}{8\pi^2} \int \frac{d\alpha}{\pi^4} \langle \varphi_1, \theta, \varphi_2 | \alpha \rangle F(\alpha) (1 + 2Q) \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^* \alpha\right), \quad (2.17)$$

где

$$d\alpha = \prod_{i=1}^4 [d(\operatorname{Re} \alpha_i) d(\operatorname{Im} \alpha_j)];$$

$$Q = \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}} \alpha_1 \alpha_4 + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}} \alpha_1 \alpha_3 +$$

$$+ \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}} \alpha_2 \alpha_4 - \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}} \alpha_2 \alpha_3. \quad (2.18)$$

Формула (2.17) является обращением интегрального преобразования (2.15) [392].

Рассмотрим теперь другие волновые пакеты, которые играют роль производящих функций, и получим различные интегральные представления для d -функций, используемые в дальнейшем. Учитывая (2.5) и (2.7), а также (2.4) и (2.8), находим интегральное

представление для d -функции вида

$$d_{m, m'}^j(\theta) = (2\pi i)^{-4} [(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{1/2} \times \\ \times \oint \frac{\exp\left(\frac{\eta}{\xi} \alpha_1 \alpha_4 + \frac{1}{\xi} \alpha_2 \alpha_4 + \frac{1}{\xi} \alpha_1 \alpha_3 - \frac{\eta}{\xi} \alpha_2 \alpha_3\right) da_1 da_2 da_3 da_4}{\alpha_1^{j-m} \alpha_2^{j+m} \alpha_3^{j-m'} \alpha_4^{j+m'} \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4}, \quad (2.19)$$

где $\eta/\xi = \sin(\theta/2)$, $1/\xi = \cos(\theta/2)$. Интегрирование в (2.19) производится по независимым замкнутым контурам в плоскостях комплексных переменных $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$, охватывающих один раз начало координат соответствующей плоскости.

Производя в (2.19) различные замены переменных и выполняя затем интегрирование по части переменных, авторы [391] получили различные интегральные представления для d -функции.

Рассмотрим, следуя [391, 392], некоторые из таких замен переменных, позволяющих выполнить в (2.19) одно интегрирование и, таким образом, получить волновые пакеты, являющиеся производящими функциями и зависящие уже от трех комплексных переменных.

Введем, согласно [392], новые переменные x, y, z, w :

$$x = \alpha_1 \alpha_4; \quad y = \alpha_2 \alpha_4; \quad z = \alpha_2 \alpha_3; \quad w = \alpha_1 \alpha_3, \quad (2.20)$$

причем $xz = yw$. Легко проверить, что $\alpha_1^{j-m} \alpha_2^{j+m} \alpha_3^{j-m'} \alpha_4^{j+m'} = = x^{j-m} y^{m+m'} z^{j-m'}$. Производя замену (2.20) в (2.19), получаем интегральное представление

$$d_{m, m'}^j(\theta) = (2\pi i)^{-3} [(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{1/2} \times \\ \times \oint \frac{\exp\left(\frac{\eta}{\xi} x + \frac{1}{\xi} y + \frac{1}{\xi} \frac{xz}{y} - \frac{\eta}{\xi} z\right) dx dy dz}{x^{j-m} y^{m+m'} z^{j-m'}} \frac{dx dy dz}{xyz}. \quad (2.21)$$

Из (2.21) следует, что производящая функция в переменных x, y, z имеет вид

$$\exp\left(\frac{\eta}{\xi} x + \frac{1}{\xi} y + \frac{1}{\xi} \frac{xz}{y} - \frac{\eta}{\xi} z\right) = \\ = \sum_{j, m, m'} d_{m, m'}^j \frac{x^{j-m} y^{m+m'} z^{j-m'}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}. \quad (2.22)$$

В переменных a, b, c таких, что

$$b = \alpha_2 \alpha_4; \quad ab = \alpha_2 \alpha_3; \quad c = \alpha_1 \alpha_4, \quad (2.23)$$

интегральное представление (2.19) принимает вид

$$d_{m, m'}^j(\theta) = (2\pi i)^{-3} [(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{1/2} \times \\ \times \oint \frac{\exp\left(-\frac{\eta}{\xi} ab + \frac{1}{\xi} ac + \frac{1}{\xi} b + \frac{\eta}{\xi} c\right) da db dc}{a^{j-m'} b^{j+m} c^{j-m}} \frac{da db dc}{abc}. \quad (2.24)$$

Производящая функция в переменных (2.23), как ясно из (2.24), дается формулой

$$\begin{aligned} \exp \left(-\frac{\eta}{\xi} ab + \frac{1}{\xi} ac + \frac{1}{\xi} b + \frac{\eta}{\xi} c \right) = \\ = \sum_{j, m, m'} d_{m, m'}^j(\theta) \frac{a^{j+m'} b^{j+m} c^{j-m}}{\sqrt{(j+m)! (j-m)! (j+m')! (j-m')!}}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Замене переменных вида

$$a_1 b_1 = \alpha_1 \alpha_4; \quad a_1/b_1 = \alpha_2 \alpha_4; \quad c_1/b_1 = \alpha_2 \alpha_3 \quad (2.26)$$

в (2.19) отвечает интегральное представление

$$\begin{aligned} d_{m, m'}^j(\theta) = (2\pi i)^{-3} [(j+m)! (j-m)! (j+m')! (j-m')!]^{1/2} \times \\ \times \oint \exp \left[\frac{1}{\xi} a_1 \left(\eta b_1 + \frac{1}{b_1} \right) + \frac{1}{\xi} c_1 \left(b_1 - \frac{\eta}{b_1} \right) \right] \frac{b_1^{2m}}{a_1^{j+m'} c_1^{j-m'}} \frac{da_1 db_1 dc_1}{a_1 b_1 c_1}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Соответствующее (2.27) интегральное представление очевидно:

$$\begin{aligned} \exp \left[\frac{1}{\xi} a_1 \left(\eta b_1 + \frac{1}{b_1} \right) + \frac{1}{\xi} c_1 \left(b_1 - \frac{\eta}{b_1} \right) \right] = \\ = \sum_{j, m, m'} d_{m, m'}^j(\theta) \frac{a_1^{j+m'} b_1^{-2m} c_1^{j-m'}}{\sqrt{(j+m)! (j-m)! (j+m')! (j-m')!}}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

В работах [391, 392, 298] путем выполнения интегрирования в представлении (2.21), (2.24) и (2.27) по некоторым переменным получены производящие функции двух и одной переменной. Волновые пакеты (2.22), (2.25) и (2.28) могут играть роль когерентных состояний симметричного волчка.

§ 3. Квазиклассическая асимптотика d -функций — матричных элементов группы вращений $O(3)$

Изучение поведения d -функций при больших значениях квантовых чисел («классический предел») представляет интерес как в связи с различными применениями, так и с математической точки зрения, так как через d -функции выражаются матричные элементы неприводимых представлений группы вращений $O(3)$. Отметим, что матричные элементы преобразования Боголюбова [376], как показано в [380, 381] (см. § 1 гл. X), выражаются через d -функции, так же как амплитуда перехода между уровнями Ландау в нестационарном магнитном поле (см. § 3 гл. II). Различные виды асимптотик d -функций обсуждались в работах Вигнера [320], Бруссарда и Тельхука [394], Корио [395] и Мартина [396].

Для исследования квазиклассической асимптотики матричных элементов перехода Ландау [276] предложил метод, основанный на нахождении комплексных траекторий классической системы,

и экспоненциальный характер асимптотики связал с этими комплексными траекториями. В настоящем параграфе асимптотические выражения для d -функций, следуя [392], мы будем находить методом перевала, используя интегральные представления для d -функций, найденные в § 2 (см. [298, 391]).

Методом перевала [397—399] можно оценить асимптотики при $\kappa \gg 1$ интегралов вида

$$I(\kappa) = \int_C \varphi(\zeta) \exp\{\kappa f(\zeta)\} d\zeta, \quad \zeta = (\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_n), \quad (3.1)$$

где κ — вещественное число, $\kappa \gg 1$; $\varphi(\zeta)$ и $f(\zeta)$ — аналитические функции переменных $\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_n$; C — многообразие в комплексном пространстве такое, что его граница не вносит существенного вклада в интеграл (3.1). Если контур замкнут, то подынтегральное выражение может быть мероморфной функцией. Метод перевала позволяет записать асимптотику как сумму вкладов от каждой точки перевала ζ_0 вида

$$I_{\zeta_0}(\kappa) = \left(-\frac{2\pi}{\kappa}\right)^{n/2} e^{\kappa f(\zeta_0)} \frac{\varphi(\zeta_0)}{\sqrt{\text{He} f(\zeta_0)}} + O\left(\frac{1}{\kappa}\right), \quad (3.2)$$

где $\text{He} f(\zeta)$ — детерминант матрицы, составленной из вторых производных функций $f(\zeta)$:

$$\text{He} f(\zeta) = \det \|\partial^2 f / \partial \zeta_i \partial \zeta_j\|, \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (3.3)$$

Точки перевала ζ_0 определяются уравнением $\text{grad} f(\zeta_0) = 0$. Предполагается, что вблизи ζ_0 функция $\varphi(\zeta_0)$ меняется достаточно медленно. При наличии нескольких точек перевала асимптотика интеграла $I(\kappa)$ определяется суммой вкладов вида (3.3) по всем допустимым перевальным точкам (см. [397—399]). Таким образом, асимптотика, вычисляемая методом перевала, определяется значениями подынтегральной функции в некоторых экстремальных точках.

Обычно квазиклассические амплитуды перехода в соответствии с принципом Франка — Кондона [273, 274], как показано в [276], определяются некоторыми точками в фазовом пространстве системы. Эти точки являются точками пересечений траекторий (в фазовом пространстве системы), отвечающих некоторым фиксированным интегралам движения начального и конечного состояний.

Для нахождения «квазиклассической» асимптотики d -функции в области больших значений квантовых чисел можно, следуя [392], использовать полученные в § 2 интегральные представления.

Используя (2.21), представим d -функцию в виде (3.1):

$$d_{m, m'}^j(\theta) = (2\pi i)^{-3} [(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{1/2} \times \\ \times \oint \exp\{f(x, y, z)\} \frac{dx dy dz}{xyz}, \quad (3.4)$$

где

$$f(x, y, z) = \frac{\eta}{\xi} x + \frac{1}{\xi} y + \frac{1}{\xi} \frac{xz}{y} - \\ - \frac{\eta}{\xi} z - (j - m) \ln x - (m + m') \ln y - (j - m') \ln z.$$

Асимптотика интеграла (3.4) в области больших квантовых чисел определяется точками перевала, для которых $\text{grad } f(x, y, z) = 0$. Координаты точек перевала находим из следующей системы уравнений:

$$\frac{\eta}{\xi} + \frac{1}{\xi} \frac{z}{y} = \frac{j - m}{x}; \quad \frac{1}{\xi} - \frac{1}{\xi} \frac{xz}{y^2} = \frac{m + m'}{y}; \\ - \frac{\eta}{\xi} + \frac{1}{\xi} \frac{x}{y} = \frac{j - m'}{z}. \quad (3.5)$$

Решая систему (3.5), получаем значения координат x, y, z и $w = xz/y$ точек перевала:

$$x_{1,2} = \frac{1}{2\xi\eta} \{2j\eta^2 + (m' - m)\xi^2 \mp i [4(j^2\eta^2 + mm'\xi^2) - (m + m')^2\xi^4]^{1/2}\}; \\ y_{1,2} = \frac{1}{2\xi} \{2j + (m + m')\xi^2 \pm i [4(j^2\eta^2 + mm'\xi^2) - (m + m')^2\xi^4]^{1/2}\}; \\ z_{1,2} = \frac{1}{2\xi\eta} \{-2j\eta^2 + (m' - m)\xi^2 \pm i [4(j^2\eta^2 + mm'\xi^2) - \\ - (m + m')^2\xi^4]^{1/2}\}; \\ w_{1,2} = \frac{1}{2\xi} \{2j - (m + m')\xi^2 \pm i [4(j^2\eta^2 + mm'\xi^2) - (m + m')^2\xi^4]^{1/2}\}. \quad (3.6)$$

Отметим, что

$$|x|^2 = (j - m)(j + m'); \quad |y|^2 = (j + m)(j + m'); \\ |z|^2 = (j + m)(j - m'); \quad |w_{1,2}|^2 = (j - m)(j - m').$$

Определитель, составленный из вторых производных функции по координатам x, y, z , — гессиан $\text{He } f = \|\partial^2 f / \partial \zeta_i \partial \zeta_j\|$ ($\zeta_1 = x, \zeta_2 = y, \zeta_3 = z$), входящий в (3.2), в перевальных точках можно представить с учетом (3.6) в виде

$$\text{He } f = \frac{1}{x^2 y^2 z^2 \xi^3} \{2w [j^2 (\eta^2 - 1) + mm'\xi^2] + \\ + \xi (j - m)(j - m') [2j + (m + m')\xi^2]\}. \quad (3.7)$$

При подстановке значений w (3.6), отвечающих точке перевала, в формулу (3.7) гессиан можно представить в виде

$$\text{He } f \equiv \frac{h(j, m, m')}{x_{1,2}^2 y_{1,2}^2 z_{1,2}^2 \xi^4}, \quad (3.8)$$

где $h(j, m, m') = |h(j, m, m')| \exp\{i\Phi\}$; $|h(j, m, m')| = \xi^2 [(j+m)(j-m)(j+m')(j-m')]^{1/2} [4(j^2\eta^2 + mm'\xi^2) - (m+m')^2\xi^4]^{1/2}$; фаза Φ в двух перевальных точках отличается только знаком:

$$\Phi = \pm \operatorname{arctg} \frac{j^2(\eta^2 - 1) + mm'\xi^2}{j[4(j^2\eta^2 + mm'\xi^2) - (m+m')^2\xi^4]^{1/2}}. \quad (3.9)$$

Интегрирование по переменным x, y, z в (3.4) тесно связано с интегрированием по фазовому пространству шарового волчка. Действительно, гессиан $\operatorname{He} f$ (3.8) можно выразить через классический импульс p_θ шарового волчка в виде

$$\operatorname{He} f = \frac{\sin \theta}{V(j+m)(j-m)(j+m')(j-m')} p_\theta. \quad (3.10)$$

Таким образом, точкам остановки отвечают нули $\operatorname{He} f$:

$$4(j^2\eta^2 + mm'\xi^2) - |m+m'|^2\xi^4 = 0. \quad (3.11)$$

Это, очевидно, совпадает с условием обращения в нуль квадратного корня, входящего в (3.6). При фиксированном угле θ d -функция зависит от трех дискретных переменных — квантовых чисел j, m и m' , причем $|m| \leq j$ и $|m'| \leq j, j \geq 0$. Эти условия выделяют в трехмерном пространстве (m, m', j) пирамиду с вершиной в начале координат и квадратным сечением в плоскости $j = \operatorname{const}$. Уравнению (3.11) соответствует в этом пространстве конус с вершиной в начале координат, лежащий внутри пирамиды и касающийся ее граней. Конус (3.11), соответствующий классическим точкам остановки шарового волчка, выделяет внутри пирамиды области, в которых асимптотика d -функции носит существенно различный характер. В области, лежащей внутри конуса (3.11), решения системы (3.6) комплексные (область классического движения волчка) и асимптотика носит осциллирующий характер. В области вне конуса (3.11) решения вещественные (классически недоступная область) и асимптотика является экспоненциально убывающей.

Рассмотрим сечение пирамиды плоскостью $j = \operatorname{const}, j \gg 1$. Тогда область квантовых чисел m, m' , отвечающая осциллирующей асимптотике d -функции, лежит внутри эллипса

$$\frac{M^2}{1 + \cos \theta} + \frac{M'^2}{1 - \cos \theta} = j^2, \quad (3.12)$$

где $M = 2^{-1/2}(m + m')$ и $M' = 2^{-1/2}(-m + m')$. Вне эллипса (3.12) при $j \gg 1$ асимптотика d -функции носит убывающий характер.

Асимптотика d -функции при условии, что точка (j, m, m') лежит внутри конуса (3.11), причем $j, m, m' \gg 1$ и $j \gg m, m'$, определяется вкладом в интеграл (3.4) двух перевальных точек (3.6). Вклад в интеграл (3.4) от первой перевальной точки, вычислен-

ный по формуле (3.2), будет равен

$$D_{m, m'}^{j(1)}(\theta) = \frac{\xi}{\sqrt{2\pi}} [4(j^2\eta^2 + mm'\xi^2) - (m + m')^2\xi^4]^{-1/4} \times \\ \times \exp \{ -i[(j - m) \arg x_1 + (m + m') \arg y_1 + (j - m') \arg z_1 + \\ + 2^{-1/2} \arg h(1)] + 2j \} \{ 2\pi(j - m)^{(j-m)/2} (j + m)^{(j+m)/2} (j - m')^{(j-m')/2} \times \\ \times (j + m')^{(j+m')/2} [(j - m)(j + m)(j - m')(j + m')]^{1/4} \}^{-1}. \quad (3.13)$$

Используя формулу Стирлинга $n! \approx n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}$, $n \gg 1$, выражение (3.13) можно представить в виде

$$D_{m, m'}^{j(1)}(\theta) \approx \frac{\xi}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp[-i\psi(j, m, m')]}{[4(j^2\eta^2 + mm'\xi^2) - (m + m')^2\xi^4]^{1/4}}. \quad (3.14)$$

Вычисляя вклад второй перевальной точки, получим

$$D_{m, m'}^{j(2)}(\theta) \approx \frac{\xi}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp[i\psi(j, m, m')]}{[4(j^2\eta^2 + mm'\xi^2) - (m + m')^2\xi^4]^{1/4}}. \quad (3.15)$$

Суммируя вклады двух перевальных точек, находим, что для больших квантовых чисел j, n, n' , лежащих внутри конуса (3.11), асимптотика d -функции носит осциллирующий характер:

$$d_{m, m'}^j(\theta) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \xi [4(j^2\eta^2 + mm'\xi^2) - (m + m')^2\xi^4]^{-1/4} \cos \psi(j, m, m'). \quad (3.16)$$

Аналогичная формула приведена в работе [394], где находилась методом ВКБ волновая функция сферического волчка. Фаза $\psi(j, m, m')$ была подробно исследована в работах [391, 298]. При $j \rightarrow \infty$ формула (3.16) приобретает простой вид:

$$d_{m, m'}^j(\theta) \approx \frac{\xi}{\sqrt{\pi j \eta}} \cos \left[\left(j + \frac{1}{2} \right) \theta - (m' - m) \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right]. \quad (3.17)$$

В [391] показано, что при фиксированном j фаза $\psi(j, m, m')$, определенная внутри эллипса (3.11), испытывает скачки при переходе через отрезки прямых. При $\eta^2 > 1$ эти прямые имеют вид $m' = m(\eta^2 - 1)/(\eta^2 + 1)$, $m' = -m(\eta^2 + 1)/(\eta^2 - 1)$.

Рассмотрим теперь асимптотику d -функции при условиях

$$j \gg 1, \quad \eta \ll 1, \quad j\eta^2 \sim 1, \quad \xi^2 \sim 1. \quad (3.18)$$

В этом случае эллипс (3.11) будет сильно вытянут вдоль оси M . Для получения асимптотики d -функции как внутри, так и вне конуса (3.11) при выполнении условий (3.18) удобно использовать интегральное представление (2.24). Выполняя в (2.24) интегрирование по a и b и заменяя c на $\eta/\xi^2 c$, получаем интегральное пред-

$$d_{m, m'}^j(\theta) = \left[\frac{b(j-m, \eta^2/\xi^2)}{\rho(j-m', \eta^2/\xi^2)} \right]^{1/2} (2\pi i)^{-1} \oint \left(1 + \frac{1}{\xi^2} c\right)^{j-m} \times \\ \times \left(1 - \frac{\eta^2}{\xi^2} c\right)^{j+m} \frac{dc}{c^{j-m'+1}}, \quad (3.19)$$

где

$$b\left(j-m, \frac{\eta^2}{\xi^2}\right) = \frac{(2j)!}{(j-m)!(j+m)!} \left(\frac{\eta^2}{\xi^2}\right)^{j-m} \left(\frac{1}{\xi^2}\right)^{j+m} \quad (3.20)$$

и величина $\rho(j-m', \eta^2/\xi^2)$ равна

$$\rho\left(j-m', \frac{\eta^2}{\xi^2}\right) = \frac{(2j)!}{(j-m')!(j+m)!} \left(\frac{\eta^2}{\xi^2} \frac{1}{\xi^2}\right)^{j-m'}. \quad (3.21)$$

Величину $b(j-m, \eta^2/\xi^2)$ можно записать в виде биномиального распределения $(N!/n!(N-n)!) p^n q^{N-n}$, где $p = \eta^2/\xi^2$, $N = 2j$. Условия (3.18) означают, что $p \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$ и $Np = \text{const}$, и тогда, как известно [399], биномиальное распределение переходит в распределение Пуассона $P(n) = (Np)^n \exp(-Np)/n!$:

$$b\left(j-m, \frac{\eta^2}{\xi^2}\right) \xrightarrow{j \rightarrow \infty, \eta \rightarrow 0, j\eta^2 \sim 1} \frac{(2j\eta^2/\xi^2)^{j-m} \exp(-2j\eta^2/\xi^2)}{(j-m)!}. \quad (3.22)$$

Величина $\rho(j-m', \eta^2/\xi^2)$ при выполнении (3.18) равна $(2j\eta^2/\xi^2)^{j-m'}/(j-m')!$. Подынтегральное выражение (3.19) при условии (3.18) принимает вид

$$\left(1 + \frac{1}{\xi^2} c\right)^{j-m} \left(1 - \frac{\eta^2}{\xi^2} c\right)^{j+m} \xrightarrow{j \rightarrow \infty, \eta \rightarrow 0, j\eta^2 \sim 1} (1+c)^{j-m} \exp\left(-2j \frac{\eta^2}{\xi^2} c\right) \quad (3.23)$$

и совпадает с производящей функцией для полиномов Лагерра [88].

Таким образом, (3.19), с учетом (3.22) и (3.23), позволяет выразить асимптотику d -функции в пуассоновом пределе через полиномы Лагерра [392]:

$$d_{m, m'}^j(\theta) \approx \exp\left(-\frac{j\eta^2}{\xi^2}\right) \left[\frac{(j-m')!}{(j-m)!}\right]^{1/2} \left(\frac{2j\eta^2}{\xi^2}\right)^{\frac{m'-m}{2}} L_{j-m'}^{m'-m}\left(2j \frac{\eta^2}{\xi^2}\right), \quad (3.24)$$

где $j \gg 1$; $\eta \ll 1$; $j\eta^2 \sim 1$; $\xi^2 \sim 1$. Вне эллипса (3.12), расположенного вблизи оси M , полином Лагерра, входящий в (3.24), не имеет нулей.

Рассмотренные асимптотики сохраняют свой характер в случае, если плоскость $j = \text{const}$, $j \rightarrow \infty$ заменить на другую плоскость при условии, что сечение пирамиды $j > 0$, $|m| < j$, $|m'| < j$ другой плоскостью является ограниченной областью.

Перейдем теперь к нахождению асимптотики d -функции при условии, что квантовые числа j , m , m' принадлежат некоторому двумерному некомпактному многообразию.

Пусть

$$j \gg 1; \quad \eta \ll 1; \quad \xi \sim 1; \quad \eta^2 (j + m') = \text{const.} \quad (3.25)$$

Очевидно, что плоскость $\eta^2 (j + m') = \text{const}$ параллельна грани пирамиды и ее пересечение с пирамидой ($j > 0; |m| < j; |m'| < j$) является неограниченной областью. Сечение конуса (3.11) плоскостью $\eta^2 (j + m') = c$ при условиях (3.25) является параболой, уравнение которой при малых η в проекции на плоскость m, m' принимает вид

$$M = -\frac{1}{2\sqrt{2}c} (M' + \sqrt{2}c)^2 + \frac{c}{\sqrt{2}\eta^2}. \quad (3.26)$$

Для нахождения асимптотики d -функции при условии (3.25) используем снова интегральное представление (2.24). Интегрируя в (2.24) по b , находим

$$d_{m, m'}^j(\theta) = (2\pi i)^{-2} \left[\frac{(j-m)!(j+m')!(j-m')!}{(j+m)!} \right]^{1/2} \left(\frac{1}{\xi} \right)^{j+m} \times \\ \times \oint (1 - \eta a)^{j+m} \frac{\exp\left(\frac{1}{\xi} a c + \frac{\eta}{\xi} c\right)}{a^{j-m'} c^{j-m}} \frac{da dc}{ac}. \quad (3.27)$$

Заменяя $(1 - \eta a)^{j+m}$, ввиду условия (3.25), на $\exp[-\eta(j+m)a]$ и используя разложение вида

$$\exp(ax + \beta y + \gamma xy) = \sum_{p, q=0}^{\infty} c_{pq} x^p y^q,$$

где

$$c_{pq} = \left[\frac{p+q+|p-q|}{2} \right]^{-1} \alpha^{\frac{p-q+|p-q|}{2}} \beta^{\frac{q-p+|q-p|}{2}} \gamma^{\frac{p+q-|p-q|}{2}} \times \\ \times L_{\frac{|p-q|}{2}}^{\frac{|p-q|}{2}} \left(-\frac{\alpha\beta}{\gamma} \right),$$

находим асимптотику d -функции ($m' > m$):

$$d_{m, m'}^j(\theta) \approx \exp(-j\eta^2) \left[\frac{(j+m)!(j-m)!}{(j+m')!(j-m')!} \right]^{1/2} \eta^{m'-m} L_{j-m'}^{m'-m} [\eta^2(j+m)]. \quad (3.28)$$

Так как конус (3.11) разделяет области, в которых асимптотика d -функции носит различный характер, то, как следует из (3.28), нули полиномов Лагерра лежит внутри параболы (3.26). Используя теперь известное асимптотическое выражение для полиномов Лагерра [88], из (3.28) получаем

$$d_{m, m'}^j(\theta) \approx (\pi j \eta)^{-1/2} \cos [j\theta - (m' - m) \pi/2 - \pi/4]. \quad (3.29)$$

В силу свойств симметрии d -функции асимптотика, рассмотренная в плоскости $\eta^2 (j + m) = \text{const}$, переносится на семейство

плоскостей $\eta^2 (j \pm m') = \text{const}$, $\eta^2 (j \pm m) = \text{const}$, параллельных граням пирамиды.

Вигнер показал [320], что асимптотикой квадрата модуля d -функции с $m' = j$ при $j \gg 1$ является нормальное распределение

$$|d_{m,j}^j(\theta)|^2 \approx (\pi j \sin^2 \theta)^{-1/2} \exp \left[-\frac{(m - j \cos \theta)^2}{j \sin^2 \theta} \right] \quad (3.30)$$

со средним значением проекции момента на ось z $\bar{m} = j \cos \theta$. Плоскость $j = m'$, в которой рассматриваем асимптотику d -функции (3.30), совпадает с гранью пирамиды, а прямая, вдоль которой конус (3.11) касается этой грани, определяет средние значения $\bar{m} = j \cos \theta$. Этот результат Вигнера можно связать с другой асимптотикой биномиального распределения] (3.20). Действительно, асимптотика d -функции (3.28) в плоскости $\eta^2 (j + m') = \text{const}$ была получена при условии (3.25), когда $\eta \rightarrow 0$ и биномиальное распределение $b(n, p)$ можно заменить распределением Пуассона $P(n) = (Np)^n \exp(-Np)/n!$. Однако при $Np \gg 1$ распределение Пуассона, так же как и биномиальное, переходит в нормальное распределение $G(n) = (2\pi Npq)^{-1/2} \exp[-(n - Np)^2/2Npq]$. Таким образом, при условии $2j\eta^2/\xi^2 \gg 1$ можно найти, что выражение (3.22) переходит в

$$\frac{(2j\eta^2/\xi^2)^{j-m}}{(j-m)!} \exp\left(-2j \frac{\eta^2}{\xi^2}\right) \Rightarrow (\pi j \sin \theta)^{-1/2} \exp\left[-\frac{(m - j \cos \theta)^2}{j \sin^2 \theta}\right], \quad (3.31)$$

где $\sin \theta = 2\eta/\xi^2$, $\cos \theta = 1 - 2\eta^2/\xi^2$. Величину $\rho(j - m', \frac{\eta}{\xi^2})$ (3.21) можно заменить на $(j \sin^2 \theta)^{j-m'}/2^{j-m} (j - m)!$. Выражение (3.27) можно представить теперь в виде

$$(1 + c)^{j-m} \exp\left(-2j \frac{\eta^2}{\xi^2} c\right) \Rightarrow \exp\left[(j \cos \theta - m)c - \frac{1}{4} c^2 j \sin^2 \theta\right]. \quad (3.32)$$

Производя предельный переход в (3.19) при условии $j\eta^2/\xi^2 \gg \gg 1$, с учетом (3.31) и (3.32) находим

$$d_{m,m'}^j(\theta) \approx (\pi j \sin^2 \theta)^{-1/4} \left[\frac{2^{j-m'} (j - m)!}{(j \sin^2 \theta)^{j-m'}} \right]^{1/2} \exp\left[-\frac{(m - j \cos \theta)^2}{2j \sin \theta}\right] \times \\ \times \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\exp[(j \cos \theta - m)c - 1/4 c^2 j \sin^2 \theta]}{c^{j-m'}} \frac{dc}{c}. \quad (3.33)$$

Подынтегральное выражение в (3.33) является производящей функцией для полиномов Эрмита [88]. Следовательно [392],

$$d_{m,m'}^j(\theta) \approx (-1)^{j-m'} (\pi j \sin^2 \theta)^{-1/4} [2^{j-m'} (j - m)!]^{-1/2} \times \\ \times \exp\left[-\frac{(m - j \cos \theta)^2}{2j \sin^2 \theta}\right] H_{j-m'}\left(\frac{m - j \cos \theta}{\sqrt{j \sin \theta}}\right). \quad (3.34)$$

В плоскости $j = m$ (3.34) переходит в формулу Вигнера (3.30).

В случае $j - m' > 0$ плоскость $j - m' = \text{const}$, параллельная грани пирамиды, пересекает конус (3.11). Осциллирующий характер асимптотики d -функции внутри конуса будет обусловлен полиномами Эрмита. Отметим, что в соотношении, аналогичном (3.34), полученном Корио [395], имеется лишний множитель ввиду неточности в записи предельной формулы для полинома Эрмита (см. формулу (30) в [395]).

Перейдем теперь к нахождению асимптотики d -функции при условиях, что $j \gg 1$, $\eta \ll 1$ и $\eta \sqrt{j^2 - m'^2} \sim 1$. Теперь можно найти асимптотическое поведение d -функции в случае, когда квантовые числа j и m' лежат на гиперболе вида $j^2 - m'^2 = \sigma^2/4\eta^2$, $\sigma = \text{const}$ и $|m| < j$. При достаточно больших j проекция пересечения этой поверхности с конусом (3.11) на плоскость m, m' представляет собой две параллельные прямые $M' = \pm c/\sqrt{2}$. Для нахождения асимптотики d -функции при этом условии оказывается удобным использовать интегральное представление (2.27). Выполняя интегрирование по a_1 и c_1 в формуле (2.27), легко находим интегральное представление для d -функции вида

$$d_{m, m'}^j(\theta) = \left[\frac{(j+m)!(j-m)!}{(j+m')!(j-m')!} \right]^{1/2} \frac{\xi^{-2j}}{2\pi i} \oint \frac{(1+\eta u)^{j+m'} \left(1 - \frac{\eta}{u}\right)^{j-m'}}{u^{m'-m}} \frac{du}{u}. \quad (3.35)$$

Условие $\eta \ll 1$ позволяет заменить в подынтегральном выражении (3.35) величину $(1+\eta u)^{j+m'} (1-\eta/u)^{j-m'}$ на $\exp[\eta(j+m) - \eta(j-m')/u]$. С учетом этой замены получаем

$$d_{m, m'}^j(\theta) \approx \left[\frac{(j+m)!(j-m)!}{(j+m')!(j-m')!} \right]^{1/2} \times \\ \times \frac{\xi^{-2j}}{2\pi i} \oint \frac{\exp\left[\eta(j+m)\left(u - \frac{j-m'}{j+m} \frac{1}{u}\right)\right]}{u^{m'-m}} \frac{du}{u}. \quad (3.36)$$

Интеграл, входящий в (3.36), является интегральным представлением функции Бесселя

$$\frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\exp[1/2 z (t - a^2/t)]}{t^n} \frac{dt}{t} = \frac{1}{a^n} J_n(az),$$

используя которое находим асимптотику d -функции в виде [392]

$$d_{m, m'}^j(\theta) \approx \left[\frac{(j+m)!(j-m)!}{(j+m')!(j-m')!} \right]^{1/2} \exp(-j\eta^2) \times \\ \times \left(\frac{j+m'}{j-m'} \right)^{(m'-m)/2} J_{m'-m}(2\eta \sqrt{j^2 - m'^2}) \quad (3.37)$$

при $j \gg 1$, $\eta \ll 1$, $\eta(j^2 - m'^2)^{1/2} \sim 1$. Отметим, что асимптотика (3.37) типа Хильбе была получена в [392], а для полиномов Якоби строгими математическими методами получена в [396].

В настоящее время на русском языке имеется значительная монографическая литература, посвященная теории представлений групп и алгебр Ли.

Детальному математическому изложению общей теории абстрактных групп и алгебр Ли посвящены монографии [1 — 7]. Общие вопросы теории представлений алгебр и групп Ли освещаются в [8 — 10, 202].

Теория конечномерных представлений классических групп подробно излагается в ряде работ [9—13], а теории бесконечномерных представлений посвящена монография [330]. Спинорные представления группы $O(n)$ приводятся в работе [14]. Вопросы спектрального анализа на симметричных пространствах излагаются в работах [15—20].

Различные вопросы теории представлений группы вращений $O(3)$ группы Лоренца и ее приложений в физике нашли свое отражение в монографиях [21—30, 50, 393, 388, 320].

Свойствам некоторых специальных функций и их связи с теорией представлений посвящена монография [31].

В настоящем приложении приводится сводка, содержащая связное изложение некоторых важнейших определений и результатов теории представлений. Следует отметить, что приводимые в сводке определения хотя и эквивалентны общепринятым, несколько отличаются от них по форме.

Цель сводки двоякая: во-первых, она позволяет читателю ознакомиться с краткими определениями понятия и формулировками результатов теории представлений, которые встречаются в основном тексте монографии; во-вторых, сводка может облегчить дальнейшее знакомство с обширной литературой. Сводка состоит из трех частей: I — Алгебры Ли, II — Линейные группы Ли, III — Алгебры Ли линейных групп Ли, содержащих 48 пунктов. Предполагается, что читатель свободно владеет линейной алгеброй в объеме [32—34].

Приводимая краткая сводка чисто математических результатов ни в какой мере не может заменить читателю знакомства с систематическим изложением теории представлений групп Ли и ее применений в физике.

I. Алгебры Ли

1. Алгебра Ли. Пусть X — линейное конечномерное векторное пространство, комплексное или вещественное. Пространство X является алгеброй Ли, если в пространстве X введена билинейная операция, называемая коммутированием, сопоставляющая каждой паре векторов $x, y \in X$ третий, обозначаемый как $[x, y] \in X$. Операция коммутирования должна удовлетворять

условиям:

$$1) \quad [x, y] = -[y, x] \text{ для всех } x, y \in X. \quad (1)$$

2) Для любых комплексных (вещественных) чисел λ и μ и всех $x, y, z \in X$

$$[x, \lambda y + \mu z] = \lambda [x, y] + \mu [x, z]. \quad (2)$$

3) Для любых $x, y, z \in X$

$$[x, [y, z]] + [y, [z, x]] + [z, [x, y]] = 0. \quad (3)$$

Последнее соотношение называется *тождеством Якоби*.

Векторы $x_\alpha \in X$, $\alpha = 1, \dots, n = \dim X$, образующие базис в X , называются *генераторами* алгебры Ли X .

Так как коммутатор двух генераторов является вектором пространства X , то можно записать коммутатор в виде

$$[x_\alpha, x_\beta] = c_{\alpha\beta}^\gamma x_\gamma. \quad (4)$$

Константы $c_{\alpha\beta}^\gamma$ называются *структурными постоянными* алгебры Ли X . В силу (2) и (3) структурные постоянные удовлетворяют условию

$$c_{\alpha\beta}^\gamma = -c_{\beta\alpha}^\gamma \quad (5)$$

и тождеству Якоби

$$c_{\alpha\delta}^\rho c_{\beta\gamma}^\delta + c_{\beta\delta}^\rho c_{\gamma\alpha}^\delta + c_{\gamma\delta}^\rho c_{\alpha\beta}^\delta = 0. \quad (6)$$

Нетрудно проверить, что набор структурных постоянных $c_{\alpha\beta}^\gamma$ ($\alpha, \beta = 1, \dots, n$), удовлетворяющих (5) и (6), позволяет построить алгебру Ли X .

2. Подалгебра. Подалгеброй алгебры Ли X называется подпространство $Y \subset X$, являющееся в свою очередь алгеброй Ли.

3. Идеал. Подалгебра Y алгебры Ли X называется *идеалом* в X , если для всех $x \in X$ и $y \in Y$ влечет $[x, y] \in Y$.

4. Центр. Совокупность элементов $z \in X$, коммутирующих со всеми элементами алгебры Ли X , называется ее *центром* $Z(X) = \{z: [z, x] = 0, x \in X\}$ и обозначается $Z(X)$.

Любая алгебра Ли X обладает двумя тривиальными идеалами, один из которых состоит из нуля, а другой совпадает со всей алгеброй Ли X .

5. Абелева алгебра Ли. Алгебра Ли X называется *абелевой* или *коммутативной*, если для любых элементов $x, y \in X$ их коммутатор равен нулю: $[x, y] = 0$.

6. Простая (полупростая) алгебра Ли. Алгебра Ли X называется *простой*, если она не имеет идеалов, отличных от тривиальных, и $\dim X > 1$.

Алгебра Ли X называется *полупростой*, если она является прямой суммой простых идеалов.

7. Представление алгебры Ли. Пусть V — комплексное (вещественное) линейное векторное пространство. Будем говорить, что в V действует *представление алгебры Ли X* , если каждому элементу $x \in X$ поставлен в соответствие линейный оператор T_x в пространстве V . Это соответствие удовлетворяет

условиям:

$$1) \quad T_{x+y} = T_x + T_y, \quad x, y \in X; \quad (7)$$

$$2) \quad T_{\lambda x} = \lambda T_x; \quad (8)$$

$$3) \quad [T_x, T_y] \equiv T_x T_y - T_y T_x = T_{[x, y]}. \quad (9)$$

8. Неприводимое представление алгебры Ли. Представление алгебры Ли называется *неприводимым*, если в пространстве V нет замкнутых инвариантных подпространств V' , отличных от нуля и всего пространства.

З а м е ч а н и е. Отметим, что в случае бесконечномерного пространства V подпространство V' должно быть замкнутым, а к условиям (7) — (9) добавляются соответствующие требования непрерывности (в том или ином смысле).

9. Лемма Шура. Оператор Z , коммутирующий со всеми операторами T_x неприводимого представления алгебры Ли X , кратен единичному оператору $Z = \lambda E$.

Из леммы Шура следует, что в неприводимом представлении T_x алгебры Ли X , $x \in X$, элементам центра $Z(X)$ соответствуют операторы T_z , $z \in Z(X)$, кратные единичному.

10. Присоединенное представление алгебры Ли. Любая алгебра Ли X обладает некоторым особым представлением, которое связано с операцией коммутирования. Для любого фиксированного элемента $x \in X$ рассмотрим коммутатор $[x, y]$ для всех $y \in X$. Этот коммутатор позволяет построить некоторый линейный оператор следующим образом: каждому вектору $y \in X$ поставим в соответствие вектор $[x, y]$. Соответствующий линейный оператор, обозначаемый $\text{ad } x$, определен на алгебре Ли X , рассматриваемой как векторное пространство:

$$\text{ad } x (y) = [x, y], \quad x, y \in X. \quad (10)$$

Легко проверить, что операторы $\text{ad } x$ задают представление алгебры Ли X , которое называется *присоединенным представлением*.

В базисе $\{x_\beta\}$ оператору $\text{ad } x_\alpha$ отвечает матрица $c^\alpha = \|c_{\beta\gamma}^\alpha\|$, построенная из структурных постоянных (4) по формуле

$$(c^\alpha)_{\beta\gamma} = c_{\alpha\gamma}^\beta. \quad (11)$$

Так как $\text{ad } x$ является представлением, то матрицы c^α удовлетворяют условию (4), т. е. имеет место равенство

$$c^\alpha c^\beta - c^\beta c^\alpha = c_{\alpha\beta}^\gamma c^\gamma. \quad (12)$$

В справедливости (12) легко убедиться непосредственной проверкой, используя определение c^α и тождество Якоби (6).

Отметим, что всякий идеал Y алгебры X является инвариантным пространством присоединенного представления.

Центр алгебры Ли в присоединенном представлении переходит в нуль.

Алгебра Ли X является простой алгеброй Ли X тогда и только тогда, когда представление $\text{ad } x$, не равное тождественно нулю, является неприводимым.

11. Форма Киллинга — Картана. Присоединенное представление позволяет на всякой алгебре Ли определить некоторую билинейную форму

$B(x, y)$, называемую *формой Киллинга — Картана*. Любой паре векторов $x, y \in X$ поставим в соответствие число $B(x, y)$, равное следу произведения двух операторов $\text{ad } x, \text{ad } y$ присоединенного представления:

$$B(x, y) = \text{Tr}(\text{ad } x \circ \text{ad } y). \quad (13)$$

В базисе алгебры Ли $X \{x_\alpha, \alpha = 1, 2, \dots, n\}$ форма Киллинга — Картана задается метрическим тензором $g_{\alpha\beta} = B(x_\alpha, y_\beta)$, который легко выразить через структурные константы:

$$g_{\alpha\beta} = c_{\alpha\rho}^\gamma c_{\beta\gamma}^\rho. \quad (14)$$

Форма Киллинга — Картана позволяет весьма просто сформулировать критерий полупростоты (простоты) алгебры Ли, доказательство которого приведено в [4 — 7, 10, 15].

12. Критерий Картана. Для того чтобы алгебра Ли X была полупростой, необходимо и достаточно, чтобы форма $B(x, y)$ была не вырождена, т. е. $\det \|g_{\alpha\beta}\| \neq 0$.

13. Компактная алгебра Ли. Вещественная подалгебра Y алгебры Ли X называется *компактной*, если на Y форма Киллинга — Картана отрицательно определена, т. е. для любых $y_1, y_2 \in Y$ имеет место неравенство $B(y_1, y_2) < 0$.

14. Подалгебра Картана. *Картановской подалгеброй* полупростой (простой) алгебры Ли X называется подалгебра $H \subset X$, удовлетворяющая условиям:

- 1) подалгебра H является максимальной абелевой подалгеброй в X ;
- 2) для любого $h \in H$ собственные векторы оператора $\text{ad } h$ образуют базис в алгебре Ли X , рассматриваемой как комплексное векторное пространство.

Можно показать, что в любой полупростой алгебре Ли X существует картановская подалгебра [1 — 7, 10, 15]. Для вещественных и комплексных простых алгебр Ли картановские подалгебры найдены в явном виде в работе [192].

15. Ассоциативная алгебра. Векторное пространство X над полем C комплексных (или полем R вещественных) чисел, для всех пар элементов которого, кроме сложения и умножения на числа, определена еще операция умножения, удовлетворяющая условиям:

- 1) дистрибутивности: $a, b, c \in X, \lambda \in C$,

$$(a + b)c = ac + bc, \quad c(a + b) = ca + cb;$$

$$(\lambda a)c = \lambda(ac) = c(\lambda a) = \lambda(ca);$$

- 2) ассоциативности:

$$(ab)c = a(bc),$$

называется *ассоциативной алгеброй*.

Если размерность векторного пространства конечна, то алгебра X называется *конечномерной*, и *бесконечномерной* — в противном случае.

16. Полная матричная алгебра. Совокупность всех квадратных комплексных (вещественных) матриц размером $n \times n$ образует с обычными операциями сложения матриц и умножения матрицы на комплексное число комплексное (вещественное) пространство $M(n, C)$ ($M(n, R)$) размерности n^2 .

Если для всех пар элементов $M(n, C)$ определить операцию умножения как обычное умножение матриц, то $M(n, C)$ становится ассоциативной алгеброй. Алгебра $M(n, C)$ называется *полной матричной алгеброй*. Если в алгебре $M(n, C)$ ввести операцию коммутирования матриц $[x_1, x_2] = x_1x_2 - x_2x_1$ для всех $x_1, x_2 \in M(n, C)$, то $M(n, C)$ становится алгеброй Ли.

17. Универсальная обертывающая алгебра алгебры Ли. Наименьшая ассоциативная алгебра $U(X)$, содержащая алгебру Ли X как подалгебру, называется *универсальной обертывающей алгеброй* алгебры Ли X . Операция коммутирования для произвольных элементов $x, y \in X$ определяется в $U(X)$ обычным образом: $[x, y] = xy - yx$.

Приведем конструкцию универсальной обертывающей алгебры $U(X)$. Пусть $\{x_\alpha\}$ — генераторы алгебры Ли X ; тогда любой элемент $x \in X$ имеет вид $x = x^\alpha x_\alpha$, где x^α — комплексные (вещественные) числа. Рассмотрим теперь тензорные степени векторного пространства X , т. е. тензоры ранга N :

$$u^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N}, \quad N = 0, 1, 2, \dots, \infty. \quad (15)$$

В качестве образующих алгебры $U(X)$, линейные комбинации которых порождают всю алгебру $U(X)$, рассмотрим все выражения вида

$$1, x_{\alpha_1}, x_{\alpha_1}x_{\alpha_2}, x_{\alpha_1}x_{\alpha_2}x_{\alpha_3}, \dots, x_{\alpha_1}x_{\alpha_2} \dots x_{\alpha_N} \dots, \quad (16)$$

являющиеся формальными произведениями генераторов $x_\alpha \in X$ и подчиняющиеся ассоциативному закону. Будем предполагать, что произведение элементов x_α и x_β таково, что выполняется условие

$$x_\alpha x_\beta - x_\beta x_\alpha = c_{\alpha\beta}^\gamma x_\gamma, \quad (17)$$

где $c_{\alpha\beta}^\gamma$ — структурные константы алгебры X . Используя произведения вида (16) и тензоры (15) соответствующих рангов, определим все элементы u бесконечномерной алгебры в виде формальных сумм

$$u = u^0 + u^\alpha x_\alpha + u^{\alpha_1 \alpha_2} x_{\alpha_1} x_{\alpha_2} + \dots + u^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N} x_{\alpha_1} x_{\alpha_2} \dots x_{\alpha_N} + \dots \quad (18)$$

Произведение элементов $u, v \in U(X)$ вида (18) определим так, чтобы в алгебре $U(X)$ выполнялись ассоциативный и дистрибутивный законы, т. е. как произведение многочленов от некоммутирующих переменных x_α , удовлетворяющих (17).

Разложение (18) элемента u можно сделать однозначным, если считать тензоры $u^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N}$ симметризованными.

Можно показать, что представлению T_x алгебры Ли X в пространстве U отвечает представление универсальной обертывающей алгебры $U(X)$ такое, что элементу $u \in U(X)$ вида (18) отвечает линейный оператор T_u вида

$$T_u = u^0 + u^\alpha T_{x_\alpha} + u^{\alpha_1 \alpha_2} T_{x_{\alpha_1}} T_{x_{\alpha_2}} + \dots + u^{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N} T_{x_{\alpha_1}} T_{x_{\alpha_2}} \dots T_{x_{\alpha_N}} + \dots \quad (19)$$

18. Центр универсальной обертывающей алгебры. Подмножество элементов $U(X)$, коммутирующее со всеми элементами $u \in U(X)$, называется *центром* $Z(U)$ универсальной обертывающей алгебры $U(X)$, т. е. $z \in Z(U)$,

если $z \in U(X)$, $zu = uz$ для всех $u \in U(X)$. Центр $Z(U)$ является подалгеброй в $U(X)$.

Можно показать, что в центре $Z(U)$ существует конечное число полиномиальных образующих C_1, C_2, \dots, C_p таких, что для любого элемента $z \in Z(U)$ найдется полином \mathcal{P} от p переменных такой, что $z = \mathcal{P}(C_1, C_2, \dots, C_p)$.

В свою очередь образующие C_1, C_2, \dots, C_p центра являются полиномами от генераторов $x_\alpha \in X$:

$$C_i = \mathcal{P}_i(x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}, \dots, x_{\alpha_n}).$$

Некоторые методы построения элементов центра универсальной обертывающей алгебры приведены в работах [35, 36].

19. Элемент Казимира. Пусть X — простая (полупростая) алгебра Ли X ; тогда существует элемент C_2 , называемый *элементом Казимира*, принадлежащий центру $Z(U)$ универсальной обертывающей алгебры $U(X)$. Элемент Казимира легко выразить через генераторы x_α и метрический тензор $g_{\alpha\beta}$ (14):

$$C_2 = g^{\alpha\beta} x_\alpha x_\beta, \quad (20)$$

где $g^{\alpha\beta}$ — матрица, обратная матрице $\|g_{\alpha\beta}\|$ метрического тензора, которая существует, так как $\det \|g_{\alpha\beta}\| \neq 0$ (см. п. 12).

20. Операторы Казимира. Пусть $x \rightarrow T_x$, $x \in X$, — представление алгебры Ли X ; соответствующее ему представление универсальной обертывающей алгебры $U(X)$ алгебры Ли X : $u \rightarrow T_u$, $u \in U(X)$. При этом в представлении $u \rightarrow T_u$, $u \in U(X)$, образующие центра $Z(U)$ C_1, C_2, \dots, C_p переходят в операторы:

$$C_i = \mathcal{P}(T_{x_{\alpha_1}}, T_{x_{\alpha_2}}, \dots, T_{x_{\alpha_n}}), \quad (21)$$

которые называются *операторами Казимира*. В частности, элементу Казимира (20) отвечает оператор Казимира $C_2 = g^{\alpha\beta} T_{x_\alpha} T_{x_\beta}$.

Если представление алгебры Ли X неприводимо, то в силу леммы Шура, операторы Казимира C_i кратны единичному оператору: $C_i = \lambda_i E$. Собственные значения λ_i операторов Казимира C_i зависят от представления T_x алгебры Ли X .

В работе [39] дан метод нахождения этих чисел λ_i . Собственные значения операторов Казимира вычислены в явном виде в [37] для представлений (конечномерных и бесконечномерных) простых и полупростых алгебр Ли. Для конечномерных представлений классических алгебр Ли собственные значения операторов Казимира вычислены в [9, 38].

II. Линейные группы Ли

21. Группа. Множество элементов G называется *группой*, если для его элементов определен закон композиции (умножения), удовлетворяющий условиям:

1) Для любой пары элементов $g_1, g_2 \in G$ определен третий, называемый произведением $g_1 \cdot g_2$, тоже принадлежащий G .

2) Произведение элементов ассоциативно:

$$(g_1 g_2) g_3 = g_1 (g_2 g_3). \quad (22)$$

3) Существует элемент $e \in G$, называемый единицей группы, такой, что

$$ge = g, \quad eg = g \quad (23)$$

для всех $g \in G$.

4) Для любого элемента g существует обратный элемент g^{-1} такой, что

$$gg^{-1} = e, \quad g^{-1}g = e. \quad (24)$$

22. Подгруппа. Множество $H \subset G$ называется *подгруппой* группы G , если оно является группой относительно умножения, заданного в G .

23. Абелева группа. Группа G называется *абелевой* или *коммутативной* если для любых $g_1, g_2 \in G$ имеет место $g_1 g_2 = g_2 g_1$.

24. Нормальный делитель. Подгруппа H группы G называется *нормальным делителем* группы G (или инвариантной подгруппой), если для любого $h \in H$ имеет место $ghg^{-1} \in H$ для всех $g \in G$. Группа G , а также подгруппа, содержащая один элемент e , являются нормальными делителями, которые называются тривиальными нормальными делителями.

25. Центр группы. Совокупность всех элементов группы G , перестановочных с каждым элементом из G , называется *центром* группы G и обозначается $Z(G)$.

26. Представление группы. Пусть G — группа, V — линейное векторное пространство. Будем говорить, что задано *представление* $T_g: g \rightarrow T_g$ группы G в пространстве V , если каждому элементу $g \in G$ поставлен в соответствие линейный оператор T_g в V , причем удовлетворяются условия:

$$1) \quad T_e = E, \quad (25)$$

где E — единичный оператор в V ;

$$2) \quad T_{g_1} T_{g_2} = T_{g_1 g_2} \quad (26)$$

для всех $g_1, g_2 \in G$.

З а м е ч а н и е. Для непрерывных групп G на соответствие $g \rightarrow T_g$ следует наложить, помимо условий 1) и 2), некоторые естественные условия непрерывности (см. [8—10]).

27. Неприводимое представление группы. Представление T_g группы G в пространстве V называется *неприводимым представлением*, если в пространстве V нет замкнутых инвариантных подпространств $V' \subset V$, отличных от нуля и всего V .

28. Лемма Шура. Если оператор Z коммутирует со всеми операторами T_g неприводимого представления группы G , $T_g Z = Z T_g$ для всех $g \in G$, то Z кратен единичному оператору $Z = \lambda E$, где λ — число.

Из леммы Шура следует, что неприводимые представления абелевой группы G являются одномерными.

29. Полная линейная группа. Рассмотрим в комплексном линейном векторном пространстве V размерности n линейные преобразования V в себя. Совокупность всех обратимых линейных преобразований пространства V образует группу, законом умножения в которой является композиция преобразований. Она называется *полной линейной комплексной группой* и обозначается $GL(n, C)$. Эта группа допускает простую матричную реализацию.

Если в пространстве V фиксировать некоторый базис, то линейным преобразованиям в этом базисе будут соответствовать квадратные матрицы $\|g_{ik}\|$, $i, k = 1, 2, \dots, n$, где матричные элементы g_{ik} — комплексные числа. Обратимым линейным преобразованиям пространства V отвечают невырожденные матрицы g , $\det \|g_{ik}\| \neq 0$. Произведению линейных преобразований отвечает произведение соответствующих матриц, тождественному преобразованию отвечает единичная матрица. Таким образом, $GL(n, C)$ — это группа невырожденных квадратных комплексных матриц $n \times n$.

Совокупность всех вещественных невырожденных квадратных матриц размером $n \times n$ образует группу, которая называется *вещественной линейной группой* и обозначается $GL(n, R)$.

30. Линейные алгебраические группы. Группа G называется *комплексной линейной алгебраической группой* (соответственно, *вещественной*), если она является подгруппой некоторой полной линейной группы $GL(n, C)$ (соответственно, *вещественной* $GL(n, R)$) и элементы $g = \|g_{ik}\| \in G$ удовлетворяют системе алгебраических уравнений]

$$\mathcal{P}_1(g_{ik}) = 0, \quad \mathcal{P}_2(g_{ik}) = 0, \quad \dots, \quad \mathcal{P}_p(g_{ik}) = 0, \quad (27)$$

где $\mathcal{P}_j(g_{ik})$ — полиномы.

Оказывается, что подавляющее большинство групп, возникающих в различных физических задачах, являются линейными алгебраическими группами. В свою очередь линейные алгебраические группы являются важнейшими представителями более общего класса непрерывных групп, так называемых *групп Ли*. Различные аспекты теории абстрактных групп Ли изложены в монографиях [1 — 7].

31. Линейная группа Ли. Группа G называется *p -мерной линейной группой Ли*, если выполнены следующие условия:

1) Группа G является подгруппой группы $GL(n, R)$.

2) Существует окрестность U единичной матрицы E в линейном пространстве $M(n, R)$ всех квадратных матриц размером $n \times n$ такая, что для $g = \|g_{ik}\| \in G$, $g \in U$, матричные элементы g_{ik} являются непрерывно дифференцируемыми функциями $g_{ik} = g_{ik}(u_1, u_2, \dots, u_p)$ p вещественных параметров u_s , $s = 1, 2, \dots, p$, $|u_s| < u_0$.

3) Ранг якобиевой матрицы $\|\partial g_{ik}/\partial u_s\|$, имеющей n^2 строк и p столбцов, равен p при всех $|u_s| < u_0$.

Можно показать, что линейная алгебраическая группа является линейной группой Ли. Линейные группы Ли являются важнейшими представителями абстрактных групп Ли.

Существенную роль в теории групп Ли играют одномерные подгруппы Ли, так называемые *однопараметрические подгруппы*.

32. Однопараметрическая подгруппа. Гладкая кривая $g(t) \in G$, $-\infty < t < \infty$, в группе G , проходящая через единицу $g(0) = e$, называется *однопараметрической подгруппой*, если для любых вещественных параметров t_1, t_2 имеет место равенство

$$g(t_1) g(t_2) = g(t_1 + t_2). \quad (28)$$

33. Компактная группа Ли. Линейная группа Ли G называется *компактной группой*, если множество ее элементов $g = \|g_{ik}\|$, $g \in G$, $i, k = 1, 2, \dots, n$, является ограниченным и замкнутым подмножеством в линейном

пространстве $M(n, R)$ всех квадратных матриц размером $n \times n$. Ограниченность подмножества G в $M(n, R)$ означает, что матричные элементы g_{ik} равномерно ограничены, т. е. существует число $K > 0$ такое, что для всех $g = \|g_{ik}\| \in G$ $|g_{ik}| < K$ при $i, k = 1, 2, \dots, n$. Замкнутость означает, что предел любой сходящейся последовательности матриц g_p , принадлежащих G , $g_p \in G$, тоже принадлежит группе G :

$$g = \lim_{p \rightarrow \infty} g_p \in G.$$

Важнейшим примером компактной линейной группы Ли служит унитарная группа $U(n)$.

34. Унитарная группа $U(n)$. Группа обратимых линейных преобразований линейного комплексного векторного пространства V , сохраняющих невырожденную положительную эрмитову квадратичную форму, называется *унитарной группой* и обозначается $U(n)$. Унитарная группа допускает матричную реализацию. Унитарная группа $U(n)$ — это группа всех унитарных матриц $u = \|u_{ij}\|$ таких, что $uu^\dagger = u^\dagger u = E$ (\dagger означает эрмитово сопряжение), E — единичная матрица, $i, j = 1, 2, \dots, n$.

35. Классические группы. А) *Специальная линейная группа.* Совокупность всех комплексных матриц $g = \|g_{ik}\|$ размером $n \times n$ с определителем $\det g = 1$ образует группу, которая называется *специальной линейной комплексной группой* и обозначается $SL(n, C)$. Максимальной компактной подгруппой в $SL(n, C)$ является группа $SU(n) = SL(n, C) \cap U(n)$, т. е. подгруппа унитарных матриц u , $uu^\dagger = E$, с определителем $\det u = 1$.

Б) *Ортогональная группа.* Линейные обратимые преобразования комплексного векторного пространства V размерности n , сохраняющие невырожденную симметричную билинейную форму, образуют группу, которая называется *ортогональной комплексной группой* и обозначается $O(n, C)$. Ортогональная группа $O(n, C)$ — это совокупность ортогональных матриц $g = \|g_{ik}\|$, таких, что $\tilde{g}g = g\tilde{g} = E$, где \sim означает транспонирование. Максимальной компактной подгруппой в группе $O(n, C)$ является группа ортогональных вещественных матриц $O(n) = O(n, C) \cap U(n)$.

В) *Симплектическая группа.* Линейные обратимые преобразования комплексного векторного пространства V размерности $2n$, $n = 1, 2, \dots$, сохраняющие невырожденную кососимметричную форму, образуют группу, которая называется *комплексной симплектической группой* и обозначается $Sp(2n, C)$. Симплектическая группа $Sp(2n, C)$ — это группа матриц $g = \|g_{ik}\|$ размером $2n \times 2n$ таких, что $\tilde{g}Jg = J$, где J — блочная матрица вида $J = \begin{pmatrix} 0 & E_n \\ -E_n & 0 \end{pmatrix}$, E_n — единичная матрица $n \times n$. Максимальной компактной подгруппой в группе $Sp(2n, C)$ является подгруппа $Sp(2n, C) \cap U(n)$, обозначаемая $Sp(2n)$.

36. Группа Гейзенберга — Вейля $H(N)$. Группа $H(N)$ — это группа вещественных матриц $h \in H(N)$ размером $(N+2) \times (N+2)$ вида

$$h(a, b, z) = \begin{pmatrix} 1 & \tilde{b} & z \\ 0 & E_N & a \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (29)$$

где \mathbf{a} и \mathbf{b} — векторы-столбцы с вещественными координатами $\mathbf{a} = \{a_i\}$, $\mathbf{b} = \{b_i\}$, $i = 1, \dots, N$; z — вещественное число, E_N — единичная матрица размером $N \times N$. Группа $H(N)$ зависит от $2N + 1$ параметра. Элементы вида $h(0, 0, z)$ при $\mathbf{a} = \mathbf{b} = 0$ образуют центр группы $H(N)$.

III. Алгебры Ли линейных групп Ли

37. Касательная матрица. Пусть G — линейная группа Ли и $g(t)$ — гладкая кривая $g(t) \in G$, проходящая через единицу группы G , $g(0) = e$. Матрица $x = \left. \frac{dg}{dt} \right|_{t=0}$ называется *касательной матрицей* к кривой $g(t)$ в точке e .

38. Касательное пространство. Совокупность всех касательных матриц в точке $e \in G$ ко всем гладким кривым $g(t)$ в группе G образует векторное пространство, которое будем называть *касательным пространством группы G* в точке e и обозначать \mathfrak{G} .

Можно показать, что если x — касательная матрица, принадлежащая касательному пространству \mathfrak{G} группы G , то гладкая кривая $g(t) = \exp(xt)$, $-\infty < t < \infty$, является однопараметрической подгруппой группы G .

Пусть $g_1(t)$ и $g_2(t)$ — однопараметрические подгруппы группы G , порожденные касательными матрицами $x_1, x_2 \in \mathfrak{G}$, $g_i(t) = \exp(x_i t)$. Тогда легко проверить, что

1) кривой $g(t) = g_1(t)g_2(t)$ соответствует касательная матрица

$$x = \left. \frac{dg}{dt} \right|_{t=0} = x_1 + x_2;$$

2) кривой $g(t) = g_1(\sqrt{t})g_2(\sqrt{t})g_1(-\sqrt{t})g_2(-\sqrt{t})$ соответствует касательная матрица

$$x = \left. \frac{dg}{dt} \right|_{t=0} = x_1x_2 - x_2x_1;$$

3) кривой $g(t) = \exp(\lambda x_1 t)$, λ — вещественное или комплексное число, соответствует касательная матрица

$$x = \left. \frac{dg}{dt} \right|_{t=0} = \lambda x_1;$$

4) кривой $g(t) = g_0 \exp(x_1 t) g_0^{-1}$, $g_0 \in G$, соответствует касательная матрица

$$x = \left. \frac{dg}{dt} \right|_{t=0} = g_0 x g_0^{-1}.$$

39. Алгебра Ли линейной группы Ли. Свойства 1)–3) п. 38 показывают, что если в касательном пространстве \mathfrak{G} линейной p -мерной группы Ли G определить операцию коммутирования двух касательных матриц $x_1, x_2 \in \mathfrak{G}$ согласно $[x_1, x_2] = x_1x_2 - x_2x_1$, то \mathfrak{G} будет являться алгеброй Ли, которая называется *алгеброй Ли группы Ли G* .

Следует отметить, что соответствие между группой Ли G и ее алгеброй Ли таково, что

А) если H — подгруппа Ли *) группы Ли G , а \mathfrak{H} и \mathfrak{G} — соответствующие им алгебры Ли, то \mathfrak{H} является подалгеброй алгебры Ли \mathfrak{G} ;

Б) если H — инвариантная подгруппа Ли группы Ли G , а \mathfrak{H} и \mathfrak{G} — соответствующие им алгебры Ли, то \mathfrak{H} является идеалом алгебры Ли \mathfrak{G} ;

В) если H — компактная подгруппа Ли группы Ли G , а \mathfrak{H} и \mathfrak{G} — соответствующие им алгебры Ли, то подалгебра \mathfrak{H} алгебры \mathfrak{G} является компактной.

40. Простая группа Ли. Группа Ли G называется *простой*, если соответствующая ей алгебра Ли \mathfrak{G} простая.

41. Подгруппа Картана. Подгруппа Ли H простой группы Ли G называется *картановской*, если подалгебра Ли \mathfrak{H} подгруппы H является картановской подалгеброй в алгебре Ли \mathfrak{G} группы G .

42. Присоединенное представление Ad_G . Пусть G — линейная группа Ли и \mathfrak{G} — ее алгебра Ли. В алгебре Ли \mathfrak{G} , рассматриваемой как векторное пространство, определим линейный оператор $\text{Ad } g$, $g \in G$, следующим образом: каждой касательной матрице $x \in \mathfrak{G}$ и произвольному элементу $g \in G$ поставим в соответствие касательную матрицу $g x g^{-1}$ (см. свойство 4) п. 38), т. е.

$$\text{Ad } g (x) = g x g^{-1} \quad (30)$$

для всех $x \in \mathfrak{G}$. Легко проверить, что соответствие $g \rightarrow \text{Ad } g$ задает представление группы G в ее алгебре Ли \mathfrak{G} , рассматриваемой как векторное пространство, которое называется *присоединенным представлением группы G* . Очевидно, что элементам центра $Z(G)$ группы G в присоединенном представлении соответствует единичный оператор.

43. Алгебра Ли полной линейной группы. Совокупность всех квадратных комплексных матриц размером $n \times n$, с определенными в ней правилами матричного сложения и умножения матрицы на комплексное число, образует комплексное векторное пространство размерности n^2 . Это векторное пространство, снабженное операцией умножения матриц, называется *полной матричной алгеброй* и обозначается $M(n, C)$.

Легко показать, что для всех $x \in M(n, C)$ матрица

$$\exp(x) = E + x + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots \quad (31)$$

не вырождена, так как имеет место тождество $\det(\exp(x)) = \exp(\text{Tr } x)$, где Tr обозначает след матрицы: $\text{Tr } x = \sum_i x_{ii}$. Справедливо обратное утверждение:

любая комплексная невырожденная матрица $g = \|g_{ik}\|$, $\det g \neq 0$, допускает представление в виде $g = \exp x$, где $x \in M(n, C)$.

Однопараметрические подгруппы $GL(n, C)$ порождаются элементами $x \in M(n, C)$, $g(t) = \exp(tx)$.

Совокупность всех квадратных комплексных матриц x размером $n \times n$ превращается в алгебру Ли, если в $M(n, C)$ определить операцию коммутирования двух матриц x_1, x_2 обычным образом: $[x_1, x_2] = x_1 x_2 - x_2 x_1$. Легко проверить, что все условия, входящие в определение алгебры Ли, выполнены. Таким образом, полная матричная алгебра $M(n, C)$ является алгеброй Ли группы $GL(n, C)$.

*) Подгруппа H группы Ли G , являющаяся в свою очередь группой Ли, называется *подгруппой Ли группы G* .

Аналогичным образом, алгеброй Ли вещественной группы $GL(n, R)$ является вещественная полная матричная алгебра $M(n, R)$.

44. Простые алгебры Ли A_n, B_n, C_n, D_n . Классические группы $SL(n, C), O(n, C)$ и $Sp(2n, C)$ порождают четыре серии простых алгебр Ли, свойства которых подробно изложены в [1—7, 9, 10, 15].

А) Простые алгебры A_n . Классической группе $SL(n, C)$ — группе комплексных квадратных матриц g размером $n \times n$ с $\det g = 1$ — отвечает простая комплексная алгебра Ли, обозначаемая A_{n-1} , $n \geq 2$.

Алгебра Ли A_n — это совокупность всех комплексных матриц x размером $n \times n$, след которых равен нулю: $\text{Tr } x = 0$.

Форма Киллинга — Картана $B(x, y)$, $x, y \in A_{n-1}$, для A_{n-1} задается формулой $B(x, y) = 2n \text{Tr } xy$. Максимальной компактной подгруппе $SU(n)$ ($u^\dagger u = E, \det u = 1$) группы $SL(n, C)$ отвечает компактная подалгебра алгебры Ли A_{n-1} , состоящая из всех косоэрмитовых матриц x размером $n \times n$, удовлетворяющих условию $x^\dagger = -x$. Алгебра Ли косоэрмитовых матриц образует вещественную подалгебру алгебры Ли A_{n-1} . Форма Киллинга — Картана $B(x, x) = 2n \text{Tr } (xx)$ для элементов $x = -x^\dagger$ отрицательно определена. Картановская подалгебра алгебры Ли A_{n-1} состоит из всех диагональных матриц, след которых равен нулю.

Б) Простые алгебры B_n . Классической группе $O(2n+1, C)$ — группе комплексных ортогональных матриц g , $g\bar{g} = E$, размером $(2n+1) \times (2n+1)$ — отвечает простая комплексная алгебра Ли, обозначаемая B_n , $n \geq 1$.

Алгебра Ли B_n — это совокупность всех комплексных кососимметричных матриц x размером $(2n+1) \times (2n+1)$, удовлетворяющих условию $\bar{x} = -x$.

В) Простые алгебры C_n . Классической группе $Sp(2n, C)$ — группе комплексных симплектических матриц g размером $2n$, таких, что $\bar{g}Jg = J$, $J = \begin{pmatrix} 0 & E_n \\ -E_n & 0 \end{pmatrix}$, — отвечает простая комплексная алгебра Ли, обозначаемая C_n , $n \geq 1$.

Алгебра Ли C_n — это совокупность всех комплексных матриц x размером $2n \times 2n$, удовлетворяющих условию $\bar{x} = JxJ$. Если матрицу x представить в блочном виде: $x = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{pmatrix}$, где x_i — комплексные матрицы $n \times n$, то $x_1 = -\bar{x}_4$, а x_2, x_3 — симметричные матрицы: $x_2 = \bar{x}_2, x_3 = \bar{x}_3$.

Г) Простые алгебры D_n . Классической группе $O(2n, C)$ — группе комплексных ортогональных матриц размером $2n \times 2n$ — отвечает простая комплексная алгебра Ли, обозначаемая D_n , $n > 2$.

Алгебра Ли D_n — это совокупность всех комплексных кососимметричных матриц x размером $2n \times 2n$, удовлетворяющих условию $\bar{x} = -x$.

Кроме перечисленных выше четырех бесконечных серий A_n, B_n, C_n, D_n простых комплексных алгебр Ли, существует пять особых простых комплексных алгебр Ли, обозначаемых G_2, F_4, E_6, E_7, E_8 . Конструкция и свойства особых алгебр подробно изложены в [6]. Наряду с классификацией комплексных простых алгебр Ли, имеется классификация всех вещественных простых алгебр Ли (см. [6, 7, 10, 15]).

45. Псевдоортогональная группа $O(p, q)$ и ее алгебра Ли. Вещественные матрицы $\|g_{ik}\|$ размером $(p+q) \times (p+q)$, удовлетворяющие условию $\tilde{g}I_{pq}g = I_{pq}$ (где I_{pq} — блочная матрица вида $\begin{pmatrix} E_p & 0 \\ 0 & -E_q \end{pmatrix}$, E_p и E_q — единичные матрицы размером $p \times p$ и $q \times q$ соответственно), образуют группу, которая обозначается $O(p, q)$. Группа матриц $O(p, q)$ сохраняет квадратичную форму $(x, x) = x_1^2 + \dots + x_p^2 - (x_{p+1}^2 + \dots + x_{p+q}^2)$ в $(p+q)$ -мерном линейном пространстве.

Алгебра Ли X группы $O(p, q)$ состоит из вещественных матриц x , удовлетворяющих условию $\tilde{x} = -I_{pq}xI_{pq}$. Если $x \in X$ записать в виде блочной матрицы: $x = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{pmatrix}$, то вещественные матрицы x_i , $i = 1, 2, 3, 4$, удовлетворяют соотношениям $\tilde{x}_1 = -x_1$, $\tilde{x}_2 = x_3$, $\tilde{x}_4 = -x_4$.

Алгебра Ли группы $O(p, q)$ является простой вещественной алгеброй Ли.

46. Симплектическая группа $Sp(2n, R)$ и ее алгебра Ли. Вещественной симплектической группой $Sp(2n, R)$ называется группа вещественных квадратных матриц размером $2n \times 2n$, удовлетворяющих условию $\tilde{g}Jg = J$,

где J — блочная матрица вида $J = \begin{pmatrix} 0 & E_n \\ -E_n & 0 \end{pmatrix}$, E_n — единичная матрица размером $n \times n$. Алгебра Ли X вещественной симплектической группы $Sp(2n, R)$ состоит из вещественных симплектических матриц x размером $2n \times 2n$, удовлетворяющих условию $\tilde{x} = JxJ$. Если $x \in X$ представить

в виде блочной матрицы: $x = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{pmatrix}$, где x_i , $i = 1, 2, 3, 4$, — вещественные матрицы размером $n \times n$, то $\tilde{x}_1 = -x_4$, $\tilde{x}_2 = x_3$, $\tilde{x}_4 = x_1$. Алгебра Ли группы $Sp(2n, R)$ является простой вещественной алгеброй Ли.

47. Инфинитезимальный оператор. Пусть $g \rightarrow T_g$ — представление группы G и $g(t)$ — однопараметрическая подгруппа в G , порожденная касательной матрицей $x \in \mathfrak{G}$ алгебры Ли линейной группы Ли G , $g(t) = \exp(tx)$. Определим *инфинитезимальный оператор* $T_x = \left. \frac{d}{dt} T_{g(t)} \right|_{t=0}$, отвечающий элементу $x \in \mathfrak{G}$. Так как T_g является представлением группы G , то можно показать, что соответствие $x \rightarrow T_x$ является представлением алгебры Ли \mathfrak{G} группы G . Соответствие между представлением T_g группы Ли G и ее представлением T_x алгебры Ли \mathfrak{G} таково, что для однопараметрической подгруппы $g(t)$ группы G , порожденной касательной матрицей $x \in \mathfrak{G}$, $g(t) = \exp(tx)$, имеет место равенство $Tg(t) = \exp(tT_x)$.

48. Представление Ad_G и его связь с представлением $ad_{\mathfrak{G}}$. Пусть G — группа Ли и \mathfrak{G} — ее алгебра Ли. Рассмотрим присоединенное представление Ad_G группы G : $Ad g(y) = gyg^{-1}$ для всех $g \in G$ и $y \in \mathfrak{G}$. Легко установить тождество $\left. \frac{d}{dt} Ad g(t)[y] \right|_{t=0} = [x, y] = ad x[y]$, где $g(t) = \exp(tx)$, $x, y \in \mathfrak{G}$.

Используя это тождество, можно показать, что присоединенному представлению Ad_G группы G соответствует присоединенное представление ее алгебры Ли.

1. Ikeda M., Ogawa S., Ohnuki Y.—*Progr. Theor. Phys.*, 1959, v. 22, p. 715.
2. Gell-Mann M.—*Phys. Rev.*, 1962, v. 125, p. 1067.
3. Фок В. А.—*Zs. f. Physik*, 1935, Bd. 98, S. 145; *Изв. АН СССР*, 1935, т. 8, с. 169.
4. Bargmann V.—*Zs. f. Physik*, 1936, Bd. 99, S. 576.
5. Sakita B.—*Phys. Rev.*, 1964, v. 136, p. 1317.
6. Gursev F., Radicati L.—*Phys. Rev Lett.*, 1964, v. 13, p. 173.
7. Pais A.—*Phys. Rev. Lett.*, 1964, v. 13, p. 175.
8. Barut A. O.—*Phys. Rev.*, 1964, v. 135, p. B839.
9. Dothann Y., Gell-Mann M., Neeman Y.—*Phys. Lett.*, 1965, v. 17, p. 148.
10. Mukunda N., O'Raijeertaigh L., Sudarshan E.—*Phys. Rev. Lett.*, 1965, v. 15, p. 1044; *Phys. Lett.*, 1965, v. 19, p. 322.
11. Малкин И. А., Манько В. И.—*Письма в ЖЭТФ*, 1965, т. 2, с. 230; *Ядерная физика*, 1966, т. 3, с. 372.
12. Neeman Y. *Algebraic Theory of Elementary Particles*, 1967.
13. Nambu Y.—*Progr. Theor. Phys.*, Suppl., 1966, v. 36—37, p. 368.
14. Fronsdal C.—*Phys. Rev.*, 1967, v. 156, p. 1653; 1968, v. 171, p. 1811.
15. Barut A. O., Kleinert H.—*Phys. Rev.*, 1967, v. 156, p. 1544; 1967, v. 157, p. 1180; 1967, v. 160, p. 1149; 1967, v. 161, p. 1464.
16. Годоров И. Т. *Физика высоких энергий и теория элементарных частиц*.— Киев: Наукова думка, 1967, с. 237.
17. Hwa R. C., Nuyts J.—*Phys. Rev.*, 1966, v. 145, p. 1148.
18. Moshinsky M., Quesne C.—*J. Math. Phys.*, 1971, v. 12, p. 1772, 1780.
19. Goshen S., Lipkin H. J.—*Ann. Phys.*, 1959, v. 6, p. 301, 310.
20. Majorana E.—*Nuovo Cimento*, 1932, v. 9, p. 335.
21. Barut A. O., Budini P., Fronsdal C.—*Proc. Roy. Soc.*, 1966, v. A291, p. 106.
22. Mariwalla K.—*Phys. Lett.*, 1975, v. 20C, p. 289.
23. Vacry H.—*Nuovo Cimento*, 1966, v. 41A, p. 222.
24. Gyorgyi G.—*Nuovo Cimento*, 1968, v. 43A, p. 717.
25. Hwa R. C.—*Nuovo Cimento*, 1966, v. 42B, p. 367.
26. Pratt R. H., Jordan T. F.—*Phys. Rev.*, 1966, v. 148, p. 1276; 1969, v. 188, p. 2534.
27. Musto R.—*Phys. Rev.*, 1966, v. 148, p. 1274.
28. Bander M., Itzykson C.—*Rev. Mod. Phys.*, 1966, v. 38, p. 330, 336.
29. Bohm A.—*Nuovo Cimento*, 1966, v. 43A, p. 665; *Phys. Rev.*, 1966, v. 145, p. 1212.
30. Wolf K. B.—*Nuovo Cimento*, Suppl., 1967, v. 5, p. 1041.
31. Kyriakopoulos E.—*Phys. Rev.*, 1968, v. 174, p. 1846.
32. Jauch J. M.—*Phys. Rev.*, 1939, v. 55, p. 1132 (A).
33. Jauch J. M., Hill E. L.—*Phys. Rev.*, 1940, v. 57, p. 641.
34. Baker G. A.—*Phys. Rev.*, 1956, v. 103, p. 1119.
35. Демков Ю. Н.—*ЖЭТФ*, 1954, т. 26, с. 757; 1959, т. 33, с. 88.
36. Аллилуев С. П.—*ЖЭТФ*, 1957, т. 33, с. 250.
37. Демков Ю. Н.—*ЖЭТФ*, 1963, т. 17, с. 1349.
38. Ильяева Л. А.—*Вестник ЛГУ*, 1963, т. 22, с. 56.

39. *Dulock V. A., McIntosh H. V.*— Amer. J. Phys., 1965, v. 33, p. 109.
40. *Vendramin I.*— Nuovo Cimento, 1968, v. A54, p. 190.
41. *Maiella G., Vilasi G.*— Lett. Nuovo Cimento, 1969, v. 1, p. 57.
42. *Малкин И. А., Манько В. И.*— Phys. Lett., 1970, v. 32A, p. 243.
- 42a. *Малкин И. А., Манько В. И.*— ДАН СССР, 1969, т. 188, с. 321.
43. *Малкин И. А., Манько В. И., Трифонов Д. А.*— Краткие сообщения по физике, 1971, № 5, с. 20, 27.
44. *Додонов В. В., Малкин И. А., Манько В. И.*— Препринт ФИАН СССР, 1972, № 48.
45. *Swamy V. J., Kulkarny R. C., Biedenharn L. C.*— J. Math. Phys., 1970, v. 11, p. 1165.
46. *Kulkarny R. C.*— Nuovo Cimento, 1972, v. 12B, p. 215.
47. *Dunlop B. I., Armstrong L.*— Phys. Rev., 1972, v. A6, p. 1370.
48. *Anderson R. L., Kumei S., Wulfman C. E.*— Phys. Rev. Lett., 1972, v. 28, p. 988; Rev. Mex. Phys., 1972, v. 21, p. 34.
49. *Barut A. O.*— Phys. Rev., 1965, v. 139A, p. 1433; 1967, v. 156, p. 1538; Phys. Lett., 1968, v. 26B, p. 308; Acta Phys. Acad. Sci. Hung., 1969, v. 26, p. 5.
50. *Наймарк М. А.* Линейные представления группы Лоренца.— М.: Физматгиз, 1958.
51. *Гинзбург В. Л., Манько В. И.*— Ядерная физика, 1965, т. 2, с. 1103; Nucl. Phys., 1966, v. 74, p. 577.
52. *Johnson M. H., Lippmann B. A.*— Phys. Rev., 1949, v. 76, p. 828; 1950, v. 77, p. 702.
53. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика.— М.: Физматгиз, 1963.
54. *Schrödinger E.*— Proc. Roy. Irish Acad., 1940, v. A46, p. 9.
55. *Infeld L., Hull T. E.*— Rev. Mod. Phys., 1951, v. 23, p. 21.
56. *Малкин И. А., Манько В. И.*— Письма в ЖЭТФ, 1968, т. 7, с. 105; Ядерная физика, 1969, т. 9, с. 184; ЖЭТФ, 1968, т. 55, с. 257.
57. *Bargmann V.*— Ann. Math., 1947, v. 48, p. 569.
58. *Barut A. O., Fronsdal C.*— Proc. Roy. Soc., 1965, v. A287, p. 532.
59. *Levy M.*— Proc. Roy. Soc., 1950, v. 204, p. 145.
60. *Kyriakopoulos E.*— Nuovo Cimento, 1971, v. 1A, p. 571; Nucl. Phys., 1971, v. B28, p. 61.
61. *Glauber R. J.*— Phys. Rev. Lett., 1963, v. 10, p. 84.
62. *Schrödinger E. S.*— Naturwiss., 1926, Bd. 14, S. 664.
63. *Fock V. A.*— Zs. f. Physik, 1928, Bd. 49, S. 339.
64. *Bargmann V.*— Rev. Mod. Phys., 1962, v. 34, p. 829; Comm. Pure Appl. Math., 1961, v. 14, p. 187.
65. *Dodonov V. V., Malkin I. A., Man'ko V. I.*— Nuovo Cimento, 1974, v. 24B, p. 46.
66. *Dodonov V. V., Malkin I. A., Man'ko V. I.*— Physica, 1974, v. 72, p. 597.
67. *Малкин И. А., Манько В. И.*— Препринт ФИАН СССР, 1971, № 15.
68. *Малкин И. А., Манько В. И.*— ЖЭТФ, 1968, т. 55, с. 1014.
69. *Малкин И. А., Манько В. И.*— ЖЭТФ, 1970, т. 59, с. 1746.
70. *Малкин И. А., Манько В. И.*— ТМФ, 1971, т. 6, с. 71.
71. *Малкин И. А., Манько В. И., Трифонов Д. А.*— ЖЭТФ, 1970, т. 58, с. 721.
72. *Малкин И. А., Манько В. И., Трифонов Д. А.*— Phys. Rev., 1970, v. 2D, p. 1371.
73. *Малкин И. А., Манько В. И., Трифонов Д. А.*— Phys. Lett., 1969, v. 30A, p. 414.
74. *Малкин И. А., Манько В. И., Трифонов Д. А.*— Nuovo Cimento, 1971, v. 4A, p. 773.
75. *Трифонов Д. А.* Афтореферат канд. дисс.— М.: ФИАН СССР, 1972.
76. *Малкин И. А., Манько В. И., Трифонов Д. А.*— J. Math. Phys., 1973, v. 14, p. 576.
77. *Манько В. И.* Вводная статья в сб.: Когерентные состояния в квантовой теории.— М.: Мир, 1972.

78. *Манько В. И.* Invited Talk in Proc. 2nd Intern. Colloq. on Group Theoretical Methods in Physics.— Netherlands, 1973, v. 1, p. A107.
79. *Манько В. И.* Автореферат докт. дисс.— М.: ФИАН СССР, 1972.
80. *Малкин И. А., Манько В. И.*— Препринт ОИЯИ, 1976, P2-9228.
81. *Ароисов Е. Б., Малкин И. А., Манько В. И.*— ЭЧАЯ, 1974, т. 3, с. 123.
82. *Додонов В. В., Малкин И. А., Манько В. И.*— Physica, 1972, v. 59, p. 241.
83. *Додонов В. В., Малкин И. А., Манько В. И.*— Phys. Lett., 1972, v. 39A, p. 377.
84. *Додонов В. В., Малкин И. А., Манько В. И.*— Препринт ФИАН СССР, 1974, № 106.
85. *Husimi K.*— Progr. Theor. Phys., 1953, v. 9, p. 381.
86. *Feynman R. P.*— Rev. Mod. Phys., 1948, v. 20, p. 367.
87. *Швингер Ю.* Теория квантованных полей.— М.: ИЛ, 1965.
88. *Бейтман Г., Эрдейи А.*— Высшие трансцендентные функции.— М.: Наука, 1965.
89. *Lewis H. R., Riesenfeld W. B.*— J. Math. Phys., 1969, v. 10, p. 1458.
90. *Sondheimer E. H., Wilson A. H.*— Proc. Roy. Soc., 1951, v. A219, p. 173.
91. *Дыхне А. М.*— ЖЭТФ, 1960, т. 38, с. 570.
92. *Переломов А. М., Попов В. С.*— ЖЭТФ, 1969, т. 56, с. 1375; 1969, т. 57, с. 1684.
93. *Ansbacher F.*— Zs. f. Naturforsch., 1959, Bd. 140, S. 889.
94. *Глаубер Р.* Квантовая оптика и квантовая радиофизика.— М.: Мир, 1966, с. 91.
95. *Глаубер Р.* Когерентные состояния в квантовой теории.— М.: Мир, 1972, с. 26.
96. *Клаудер Ж., Сударшан Ц.* Квантовая оптика.— М.: Мир, 1970.
97. *Перина Я.* Когерентность света.— М.: Мир, 1974.
98. *Louisell W. H.* Radiation and Noise in Quantum Electronics.— N. Y., 1964.
99. *Фейнман Р. П., Хибс А.* Квантовая механика и интегралы по траекториям.— М.: Мир, 1968.
100. *Glauber R. J.*— Phys. Rev., 1963, v. 130, p. 2529.
101. *Dodonov V. V., Malkin I. A., Man'ko V. I.*— Physica, 1970, v. A82, p. 113.
102. *Черников Н. А.*— ЖЭТФ, 1967, т. 53, с. 1006.
103. *Holz A.*— Lett. Nuovo Cimento, 1970, v. 4, p. 1319.
104. *Додонов В. В., Малкин И. А., Манько В. И.*— ТМФ, 1975, т. 24, с. 164.
105. *Dodonov V. V., Malkin I. A., Man'ko V. I.*— J. Phys., 1975, v. A8, p. L19.
106. *Dodonov V. V., Malkin I. A., Man'ko V. I.*— Int. J. Theor. Phys., 1975, v. 14, p. 37.
107. *Додонов В. В.* Автореферат канд. дисс.— М.: МФТИ, 1976.
108. *Campbell W. B., Finkler P., Jones C. E., Misheloff M. N.*— Nuovo Cimento, 1976, v. B31, p. 219.
109. *Березин Ф. А.* Метод вторичного квантования.— М.: Наука, 1965.
110. *Вон М. Н., Seligman T. H.*— J. Math. Phys., 1973, v. 14, p. 1224.
111. *Додонов В. В., Малкин И. А., Манько В. И.*— Препринт ФИАН СССР, 1975, № 151.
112. *Бахрах В. Л., Ветчинкин С. И.*— ТМФ, 1971, т. 6, с. 392.
113. *Грановский Я. И., Димашко Ю. А.*— Укр. физ. ж., 1974, т. 19, с. 1456.
114. *Додонов В. В., Малкин И. А., Манько В. И.*— Phys. Lett., 1975, v. 51A, p. 230.
115. *Gamiz P. et al.*— J. Math. Phys., 1971, v. 12, p. 2040.
116. *Лебедев Н. Н.* Специальные функции и их приложения.— М.: Физматгиз, 1963.
117. *Calogero F.*— J. Math. Phys., 1969, v. 10, p. 2191; 1971, v. 12, p. 419.
118. *Peak D., Inomata A.*— J. Math. Phys., 1969, v. 10, p. 1422.
119. *Додонов В. В., Малкин И. А., Манько В. И.*— Препринт ФИАН СССР, 1974, № 83.

120. Аллилуев С. П.— ЖЭТФ, 1971, т. 61, с. 15.
121. Санников С. С.— Ядерная физика, 1965, т. 2, с. 570.
122. Landovitz L. F.— Phys. Rev., 1975, v. A11, p. 67.
123. Додонов В. В., Малкин И. А., Маньков В. И.— Краткие сообщения по физике, 1976, № 1, с. 3.
124. Додонов В. В., Малкин И. А., Манько В. И. J. Phys., 1976, v. A9, p. 1791.
125. Williamson J.— Amer. J. Math., 1936, v. 58, p. 141.
126. Dodonov V. V., Malkin I. A., Man'ko V. I.— J. Stat. Phys., 1977, v. 16, № 4.
127. Bloch F.— Zs. f. Physik, 1932, Bd. 74, S. 295.
128. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика.— М.: Наука, 1964.
129. Wigner E.— Phys. Rev., 1932, v. 40, p. 749.
130. Dodonov V. V., Malkin I. A., Man'ko V. I.— Phys. Lett., 1976, v. 51A, p. 133.
131. Курмышев Е. В., Малкин И. А., Манько В. И.— Препринт ФИАН СССР, 1975, № 173.
132. Heisenberg W.— Zs. f. Physik, 1927, Bd. 43, S. 172.
133. Гейзенберг В. Физические основы квантовой механики.— М.: ГТТИ, 1932.
134. Weyl H.— Zs. f. Physik, 1928, Bd. 46, S. 1.
135. Carruthers P., Nieto M.— Rev. Mod. Phys., 1968, v. 40, p. 411.
136. Bohr H.— Naturwissenschaft, 1928, Bd. 16, S. 245.
137. Landau L., Peierls R.— Zs. f. Physik, 1931, Bd. 69, S. 56.
138. Smith F.— Phys. Rev., 1960, v. 118, p. 349.
139. Lippmann B.— Phys. Rev., 1966, v. 151, p. 1023.
140. Wigner E.— Phys. Rev., 1961, v. 42, p. 231.
141. Lurcat F.— Phys. Rev., 1968, v. 173, p. 1461.
142. Fleming G. N.— Nuovo Cimento, 1973, v. 16A, p. 232.
143. Фок В., Крылов Н.— ЖЭТФ, 1947, т. 17, с. 93.
144. Ахагонов У., Вохт Д.— Phys. Rev., 1961, v. 122, p. 1649; 1964, v. 134B, p. 1417.
145. Фок В.— ЖЭТФ, 1962, т. 42, с. 1135.
146. Мандельштам Л. И., Тамм И. Е.— Изв. АН СССР, сер. физ., 1945, т. 9, с. 122.
147. Eberly I. H., Singh L. P. S.— Phys. Rev., 1973, v. D7, p. 359.
148. Weisskopf V., Wigner E.— Zs. f. Physik, 1930, Bd. 63, S. 54.
149. Фон Нейман. Математические основы квантовой механики.— М.: Наука, 1964.
150. Альфвен Г., Фельтхаммар К. Г. Космическая электродинамика.— М.: Мир, 1967.
151. Kurlrud P. M.— Phys. Rev., 1957, v. 106, p. 205.
152. Lenard A.— Ann. Phys., 1959, v. 6, p. 261.
153. Stern P. D.— J. Math. Phys., 1970, v. 11, p. 2771.
154. Kruskal M.— Confer. on Plasma Physics and Controlled, Nucl. Fus. Res.— Salzburg, 1961.
155. Born M., Fock V.— Zs. f. Physik, 1973, Bd. 51, S. 381.
156. Von Neumann J., Wigner E.— Physik Zs., 1929, Bd. 30, S. 467.
157. Якубович В. А., Старжинский В. М. Линейные дифференциальные уравнения с периодическими коэффициентами и их приложения.— М.: Наука, 1972.
158. Никишов А. И., Ритус В. И.— ЖЭТФ, 1964, т. 46, с. 776.
159. Келдыш Л. В.— ЖЭТФ, 1964, т. 47, с. 1945.
160. Зельдович Я. Б.— ЖЭТФ, 1966, т. 51, с. 1492; УФН, 1973, т. 110, с. 139.
161. Ритус В. И.— ЖЭТФ, 1966, т. 51, с. 1544.
162. Зельдович Я. Б., Манаков Н. Л., Рапопорт Л. П.— УФН, 1975, т. 117, с. 563.
163. Зон Б. А., Кацнельсон Б. Г.— ЖЭТФ, 1975, т. 69, с. 1166.
164. Манаков Н. Л., Рапопорт Л. П.— ЖЭТФ, 1975, т. 69, с. 842.

165. *Berson I.* — *J. Phys.*, 1975, v. B8, p. 3078.
166. *Salzman A.* — *Phys. Rev.*, 1974, v. A10, p. 461; *Chem. Phys. Lett.*, 1974, v. 25, p. 302.
167. *Зон Б. А., Шолохов Б. М.* — *ЖЭТФ*, 1976, т. 70, с. 886.
- 168а. *Коварский В. А., Перельман Н. Ф.* — *ЖЭТФ*, 1971, т. 60, с. 509, 1389.
- 168б. *Зон Б. А., Кацнельсон Б. Г.* — *ЖЭТФ*, 1973, т. 65, с. 947.
169. *Gontier Y., Trahin M.* — *Phys. Rev.*, 1973, v. A7, p. 191.
170. *Зон Б. А., Манаков Н. Л., Рапопорт Л. П.* — *Оптика и спектроскопия*, 1975, т. 38, с. 13.
171. *Блогинцев Д. И.* — *Phys. Zs. Sowjet.*, 1933, Bd. 4, S. 501.
172. *Townes C. H., Merritt F. R.* — *Phys. Rev.*, 1947, v. 72, p. 1266L; 1947, v. 73A, p. 1249.
173. *Karplus R., Schwinger J.* — *Phys. Rev.*, 1947, v. 73, p. 1020.
174. *Karplus R.* — *Phys. Rev.*, 1948, v. 73, p. 1027.
175. *Таунс И., Шавлов А.* *Радноспектроскопия.* — М.: ИЛ, 1959.
176. *Зельдович Я. Б.* — *УФН*, 1973, т. 110, с. 139.
177. *Делоне Н. Б.* — *УФН*, 1975, т. 115, с. 361.
178. *Делоне Н. Б., Зон Б. А., Крайнов В. П., Ходовой В. А.* — *УФН*, 1976, т. 120, с. 3.
179. *Делоне Н. Б.* *Автоионизационные состояния атомов.* — М.: Изд-во МГУ, 1976.
180. *Fedorov M. V., Kudrevatova O. V., Makarov V. P., Samokhin A. A.* — *Preprint PhIAN*, 1974, № 34.
181. *Fedorov M. V., Makarov V. P.* — *Preprint PhIAN*, 1975, № 35.
182. *Шурык Э. В.* — *ЖЭТФ*, 1976, т. 71, с. 2039.
183. *Делоне Н. Б., Крайнов В. П., Ходовой В. А.* — *УФН*, 1975, т. 117, с. 189; *Делоне Н. Б., Крайнов В. П.* *Атом в сильном световом поле.* — М.: Атомиздат, 1978.
184. *Бонч-Бруевич А. М., Ходовой В. А., Чигирь Н. А.* — *ЖЭТФ*, 1974, т. 67, с. 2068.
185. *Переломов А. М., Попов В. С.* — *ТМФ*, 1969, т. 1, с. 360; 1970, т. 4, с. 48.
186. *Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М.* *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике.* — М.: Наука, 1971.
187. *Олейник В. П.* — *ЖЭТФ*, 1967, т. 52, с. 1049; 1967, т. 53, с. 1997.
188. *Бабыч В. М., Булдырев В. С.* *Асимптотические методы в задачах дифракции коротких волн.* — М.: Наука, 1972.
189. *Ivanova E. V., Malkin I. A., Man'ko V. I.* — *Preprint PhIAN*, 1976, № 109.
190. *Иванова Е. В.* *Автореферат канд. дисс.* — М.: МФТИ, 1977.
191. *Malkin I. A., Man'ko V. I., Schustov A. P.* — *Preprint PhIAN*, 1975, № 169.
192. *Sugiyra M.* — *J. Math. Soc. Japan*, 1959, v. 11, p. 37 (русск. перевод — *Математика*, 1969, т. 13 : 3, с. 101).
193. *Титчмарш Е.* *Введение в теорию интегралов Фурье.* — М.: Гостехиздат, 1948.
194. *Гельфанд И. М., Шилов Г. Е.* *Обобщенные функции и действия над ними.* — М.: Физматгиз, 1958.
195. *Фок В. А.* — *Вестник ЛГУ*, 1959, № 16, с. 67.
196. *Дирак П. А. М.* *Принципы квантовой механики.* — М.: Физматгиз, 1960.
197. *Сегал И.* *Математические проблемы релятивистской физики.* — М.: Мир, 1968.
198. *Weil A.* — *Acta Math.*, 1964, v. 111, p. 143.
199. *Кириллов А. А.* — *Функциональный анализ*, 1969, т. 3, с. 36.
200. *Segal I. E.* — *Mat. Fys. Medd Danske, Vid. Selsk*, 1959, v. 31, p. 1.
201. *Haskell T. G., Wybourne B. G.* — *Proc. Roy. Soc.*, 1973, v. 334A, p. 541.
202. *Кириллов А. А.* *Элементы теории представлений.* — М.: Наука, 1972.
203. *Шевалле К.* *Теория групп Ли.* — М.: МЛ, 1958, т. 3.
204. *Pregelov A. M.* — *Comm. Math. Phys.*, 1972, v. 26, p. 222; *ТМФ*, 1974, т. 19, м. 83; *УФН*, 1977, т. 123, с. 23.

205. *Малкин И. А.* — Труды МФТИ, 1976, № 8, с. 206.
206. *Иванова Е. В., Малкин И. А., Манько В. И.* — Phys. Lett., 1974, v. 50A, p. 24; Препринт ФИАН, СССР, 1974, № 127; В сб.: Ускорители. — М.: Атомиздат, 1975, вып. 14, с. 157; Препринт ФИАН СССР, 1975, № 94.
207. *Иванова Е. В.* Кандидатская диссертация, МФТИ, 1977.
208. *Пирс Дж. Р.* Теория и расчет электронных пучков. — М.: Сов. радио, 1956.
209. *Капица П. Л.* Электроника больших мощностей. — М.: Изд-во АН СССР, 1962.
210. *Дерюгин И. А., Воронцов В. И.* В сб.: Квантовая электроника. — Киев: Наукова думка, 1971, вып. 5, с. 281.
211. *Вайнштейн Л. А., Солнцев В. А.* Лекции по сверхвысокочастотной электронике. — М.: Сов. радио, 1973.
212. *Соколов А. А., Павленко Ю. Г.* — Письма в ЖЭТФ, 1965, т. 2, с. 449. Оптика и спектроскопия, 1967, т. 22, с. 3.
213. Сипхротронное излучение. — М.: Наука, 1966, с. 144.
214. *Graff G., Klempt E. E.* — Zs. f. Naturforsch., 1967, Bd. 22a, S. 196.
215. *Urban P., Wittman K.* — Acta Physica Austriaca, 1972, v. 35, p. 9.
216. *Деметьев А. С., Павленко Ю. Г.* — Изв. вузов, Физика, 1974, № 6, с. 62.
217. *Иванова Е. В., Малкин И. А., Манько В. И.* — Препринт ФИАН СССР, 1974, № 48; Ядерная физика, 1975, т. 21, с. 664.
218. *Докторов Е. В., Малкин И. А., Манько В. И.* — Ядерная физика, 1973, т. 18, с. 142.
219. *Боголюбов Н. Н.* — Изв. АН СССР, сер. физ., 1947, т. 11, с. 77.
220. *Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В.* — ЖЭТФ, 1949, т. 19, с. 256.
221. *Боголюбов Н. Н., Ширков Д. В.* Введение в теорию квантованных полей. — М.: Гостехиздат, 1957.
222. *Weyl H.* Gruppentheorie und Quantenmechanik. — Leipzig: Hirzel, 1928.
223. *Appel P., Kampe de Fariet J.* Fonctions Hypergeometriques et Hyper-spheriques, polinoms d'Hermite. — Paris, 1926.
224. *Де Бройль Л.* Электромагнитные волны в волноводах и полых резонаторах. — М.: ИЛ, 1948.
225. *Ланбау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Электродинамика сплошных сред. — М.: Физматгиз, 1957.
226. *Капица П. Л.* — УФН, 1951, т. 44, с. 7.
227. *Гапонов А. В., Миллер М. А.* — ЖЭТФ, 1958, т. 34, с. 242; 1958, т. 34, с. 751.
228. *Иванова Е. В., Малкин И. А., Манько В. И.* — Препринт ФИАН СССР, 1976, № 109.
229. *Воронцов В. И., Маусунбаев С. С.* — Phys. Lett., 1975, v. 53A, p. 435.
230. *Соколов А. А., Кулькин А. Г., Павленко Ю. Г.* — Атомная энергия, 1971, т. 31, с. 292.
231. *Павленко Ю. Г.* — Вестник МГУ, Физика, Астрономия, 1971, т. 12, с. 706.
232. *Павленко Ю. Г., Воронцов В. И.* — Укр. физ. ж., 1975, т. 20, с. 1931.
233. *М. Г. Крейн.* В сб.: Памяти А. А. Андропова. — М.: Изд-во АН СССР, 1955, с. 413; ДАН СССР, 1950, т. 73, с. 445.
234. *Гельфанд И. М., Лидский В. Б.* — УМН, 1955, т. 10, с. 3.
235. *Moser J.* — Comm. Pure Appl. Math., 1958, v. 11, p. 81.
236. Seminar Notes on Hamiltonian Differential System. University of Minnesota, 1962—1963.
237. *Павленко Ю. Г., Деметьев А. С.* — ЖТФ, 1969, т. 15, с. 264.
238. *Белавин А. А., Зельдович Б. Я., Переломов А. М., Попов В. С.* — ЖЭТФ, 1969, т. 56, с. 264.
239. *Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М.: Наука, 1966.
240. *Иванова Е. В., Малкин И. А., Манько В. И.* — Труды МФТИ, 1975, № 6.
241. *Иванова Е. В., Малкин И. А., Манько В. И.* — Препринт ФИАН СССР, 1976, № 99; J. Phys., 1977, v. 10, p. L 75.

242. Гапонов А. В., Петелин М. И., Юлатов В. К.— Изв. вузов, Радиофизика, 1967, т. 10, с. 1414.
243. Раутиан С. Г., Собельман И. И.— ЖЭТФ, 1961, т. 41, с. 456; 1963, т. 44, с. 934.
244. Кузнецова Т. И., Раутиан С. Г.— ЖЭТФ, 1965, т. 49, с. 1605.
245. Born M., Oppenheimer R.— Ann. d. Phys., 1927, Bd. 84, S. 457.
246. Борн М., Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток.— М.: ИЛ, 1958.
247. Born M.— Gött. Nachr., math., phys. Kl., 1951, v. 1.
248. Fultou R., Gouterman M.— J. Chem. Phys., 1961, v. 35, p. 1059.
249. Гейликман Б. Т.— УФН, 1975, т. 115, с. 403.
250. Франк-Каменецкий М. Д., Лукашин А. В.— УФН, 1975, т. 116, с. 193.
251. Morse P. M.— Phys. Rev., 1929, v. 34, p. 57; Ter-Haar D.— Phys. Rev., 1946, v. 70, p. 222.
252. Lennard-Jones J. E.— Proc. Roy. Soc., 1924, v. A106, p. 441, 463, 709.
253. Hulburt H. M., Hirschfelder J. O.— J. Chem. Phys., 1941, v. 8, p. 61.
254. Гейдон А. Энергия диссоциации и спектры двухатомных молекул.— М.: ИЛ, 1949.
255. Герцберг Г. Спектры и строение двухатомных молекул.— М.: ИЛ, 1949.
256. Герцберг Г. Электронные спектры и строение многоатомных молекул.— М.: Мир, 1969.
257. Герцберг Г. Спектры и строение простых свободных радикалов.— М.: Мир, 1974.
258. Слэтер Дж. С. Электронная структура молекул.— М.: Мир, 1965.
259. Пеннер С. С. Количественная молекулярная спектроскопия и излучательная способность газов.— М.: ИЛ, 1963.
260. Ельяшевич М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия.— М.: Физматгиз, 1962.
261. Щека Е. Ф.— УФН, 1971, т. 104, с. 593.
262. Lucas N. J. D.— J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., 1973, v. 6, p. 155.
263. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул.— М.: ИЛ, 1949.
264. Волькенштейн М. В., Грибов Л. А., Ельяшевич М. А., Степанов Б. И. Колебания молекул.— М.: Наука, 1972.
265. Вилсон Е., Дешинс Д., Кросс П. Теория колебательных спектров молекул.— М.: ИЛ, 1960.
266. Маянц Л. С. Теория и расчет колебаний молекул.— М.: Изд-во АН СССР, 1960.
267. Маянц Л. С., Авербух Б. С. Теория и расчет интенсивностей в колебательных спектрах молекул.— М.: Наука, 1971.
268. Сивин С. Колебания молекул и среднеквадратичные амплитуды.— М.: Мир, 1971.
269. Свердлов Л. М., Ковнер М. А., Крайнов Е. П. Колебательные спектры многоатомных молекул.— М.: Наука, 1970.
270. Сущинский М. М. Спектры комбинационного рассеяния молекул и кристаллов.— М.: Наука, 1969.
271. Конингсгайн И. А. Введение в теорию комбинационного рассеяния света.— М.: ИЛ, 1975.
272. Татаевский В. М. Квантовая механика и теория строения молекул.— М.: Изд-во МГУ, 1965.
273. Franck J.— Trans. Faraday Soc., 1925, v. 21, p. 536.
274. Condon E. V.— Phys. Rev., 1926, v. 28, p. 1182; 1928, v. 32, p. 858.
275. Herzberg G., Teller E.— Zs. Phys. Chem., 1933, Bd. B21, S. 410.
276. Ландау Л. Д.— Phys. Zs. Sowjet., 1932, Bd. 1, S. 88; 1932, Bd. 2, S. 46; Собрание трудов.— М.: Наука, 1969, т. 1, с. 71, 81.
277. Колесников В. Н., Лесков И. В.— УФН, 1958, т. 65, с. 3.
278. Сошкин В. Н.— УФН, 1961, т. 74, с. 61.
279. Ортенберг Ф. С., Антропов Е. Т.— УФН, 1966, т. 90, с. 237.
280. Chakraborty B., Pan Y. K.— Appl. Specktr. Rev., 1973, v. 7, p. 283.

281. Кузнецова Л. А., Кузьменко Н. Б., Кузякин Ю. Я., Пластинин Ю. А.— УФН, 1974, т. 113, с. 285.
282. Dushinsky F.— Acta Physicochim. URSS, 1937, v. 7, p. 551.
283. Пекар С. И.— УФН, 1953, т. 50, с. 197.
284. Markham J. J.— Rev. Mod. Phys., 1959, v. 31, p. 956.
285. Ребане К. К. Элементарная теория колебательной структуры спектров примесных центров кристаллов.— М.: Наука, 1968.
286. McCoy E. P., Ross J. G.— Aust. J. Chem., 1962, v. 15, p. 457.
287. Craig D. P.— J. Chem. Soc., 1950, p. 2146.
288. Coon J. B., de Wames R. E., Loyd P. M.— J. Mol. Spectrosc., 1962 v. 8, p. 285.
289. Watkins L. W.— J. Mol. Spectrosc., 1969, v. 29, p. 402.
290. Richardson A. N., Redding R. W., Brand J. C. D.— J. Mol. Spectrosc., 1969, v. 29, p. 93.
291. Dubois I.— Bull. Soc. Roy. Sci. Liege, 1970, v. 39, p. 63.
292. Scott J. D., Causley G. C., Russell B. R.— J. Chem. Phys., 1973, v. 59, p. 6577.
293. Viuesland J. P., Stricler S. J.— J. Chem. Phys., 1974, v. 60, p. 660.
294. Doktorov E. V., Malkin I. A., Man'ko V. I.— J. Mol. Spectrosc., 1975, v. 51, p. 1; Препринт ФИАН СССР, 1974, № 142.
295. Sharp T. E., Rosenstock H. M.— J. Chem. Phys., 1964, v. 41, p. 3453.
296. Smith W. L., Warsop P. A.— Trans. Faraday Soc., 1968, v. 64, p. 1165.
297. Sharf B., Honig B.— Chem. Phys. Lett., 1970, v. 7, p. 132.
298. Докторов Е. В. Автореферат канд. дисс.— Москва — Минск: ФИАН БССР, 1974.
299. Doktorov E. V., Malkin I. A., Man'ko V. I.— J. Phys. B: Atom. Mol. Phys., 1976, v. 9, p. 507.; Препринт ФИАН СССР, 1974, № 144.
300. Doktorov E. V., Malkin I. A., Man'ko V. I.— Препринт ФИАН СССР, 1975, № 176; J. Mol. Spectrosc., 1977, v. 64, p. 302.
301. Doktorov E. V., Malkin I. A., Man'ko V. I.— Chem. Phys. Lett., 1977, v. 46, p. 183.
302. Doktorov E. V., Malkin I. A., Man'ko V. I., Tyurin A. V.— Препринт ФИАН СССР, 1974, № 36.
303. Warshel A., Karplus M.— Chem. Phys Lett., 1972, v. 17, p. 7.
304. Manneback C.— Physica, 1951, v. 17, p. 1001.
305. Wilson E. B.— J. Chem. Phys., 1939, v. 7, p. 1047.
306. Elyashevitch M. A.— ДАН СССР, 1940, т. 28, с. 605.
307. Rade W. F., Beck C. A.— J. Chem. Phys., 1940, v. 8, p. 507.
308. Carforth F. M., Ingold C. K.— J. Chem. Soc., 1948, p. 417.
309. Sponer H., Nordheim G.— J. Chem. Phys., 1939, v. 7, p. 257.
310. Mayusord W. V., Ros E. M. F.— Proc. Roy. Soc., 1935, v. A152, p. 299.
311. Weigang O. E., Ong E.— J. Chem. Phys., 1969, v. 50, p. 4558.
312. Smith W. L.— Proc. Phys. Soc., 1966, v. 59, p. 1021.
313. Gregory A. R., Siebrand W., Zgierski M. Z.— J. Chem. Phys., 1976, v. 64, p. 3145.
314. Moffitt G., Moscowitz A.— J. Chem. Phys., 1959, v. 30, p. 648.
- 315a. Brom J. M., Weltner W. W., Jr.— J. Mol. Spectrosc., 1973, v. 45, p. 82.
- 315b. Santaram C., Vaidyan V. K., Winas J. G.— J. Phys. B., 1971, v. 4, p. 133.
316. Bell S.— J. Phys. B: Atom. Mol. Phys., 1970, v. 3, p. 735, 745.
317. Bell S., Warsop P. A.— J. Mol. Spectrosc., 1966, v. 20, p. 425; 1967, v. 22, p. 360.
318. Smith W. L.— Proc. Phys. Soc., 1966, v. 89, p. 1021.
319. Ковнер М. А., Горохов А. В., Герасимов Г. А., Базаров Е. Н.— Оптика и спектроскопия, 1970, т. 29, с. 666.
320. Вигнер Е. Теория групп.— М.: ИЛ, 1961.
321. Dirac P. A. M.— Proc. Roy. Soc., 1928, v. 117A, p. 610.
322. Majorana E.— Nuovo Cimento, 1932, v. 9, p. 335.
323. Гинзбург В. Л., Тамм И. Е.— ЖЭТФ, 1947, т. 17, с. 227.
324. Ginzburg V. L.— Acta Phys. Polonica, 1956, v. 15, p. 163.

325. Гинзбург В. Л., Манько В. И. — ЭЧАЯ, 1976, т. 7, с. 3.
326. Виленкин Н. Я., Сморodinский Я. А. — ЖЭТФ, 1964, т. 46, с. 3, 179.
327. Nambu Y. — Phys. Rev., 1967, v. 160, p. 1171.
328. Уиттекер Э. Т., Ватсон Д. Н. Курс современного анализа. — М.: Физматгиз, 1963.
329. Кузнецов Г. — ЖЭТФ, 1969, т. 53, с. 241.
330. Гельфанд И. М., Наймарк М. А. — Труды МИАН, 1950, т. 36.
331. Letokov V. S. — Phys. Rev., 1975, v. A12, p. 1954; Летохов В. С., Миногоин В. Г. — ЖЭТФ, 1975, т. 69, с. 1569; 1976, т. 70, с. 794.
332. Гельфанд И. М., Минлос Р. А., Шапиро Э. Я. Представления группы вращений и группы Лоренца. — М.: Физматгиз, 1961.
333. Виленкин Н. Я., Сморodinский Я. А. — ЖЭТФ, 1964, т. 46, с. 179.
334. Гельфанд И. М., Граев М. И., Виленкин Н. Я. Интегральная геометрия и связанные с ней вопросы теории представлений. — М.: Физматгиз, 1962.
335. Takabayashi T. — Nuovo Cimento, 1964, v. 33, p. 668.
336. Dirac P. A. M. — Proc. Roy. Soc., 1972, v. 322A, p. 435; 1972, v. 328B, p. 1.
337. Боголюбов П. Н. — ЭЧАЯ, 1972, т. 1, с. 144.
338. Манько В. И. — Ядерная физика, 1965, т. 2, с. 512.
339. Марков М. А. — ДАН СССР, 1956, т. 51, с. 101.
340. Markov M. A. — Nuovo Cimento, Suppl., 1956, v. 3, Ser. X, № 4, p. 760.
341. Гельфанд И. М., Яглоз Я. М. — ЖЭТФ, 1948, т. 18, с. 703, 1094, 1105.
342. Fradkin D. M. — Am. J. Phys., 1966, v. 34, p. 314.
343. Stoyanov D. T., Todorov I. T. — J. Math. Phys., 1968, v. 9, p. 2146.
344. Ruhl W. — Commun. Math. Phys., 1967, v. 6, p. 312.
345. Sudarshan E. C. G., Mukunda N. — Phys. Rev., 1970, v. D1, p. 571.
346. Ружер Ю. Б., ДАН СССР, 1970, т. 192, с. 64.
347. Mukunda N. — Phys. Rev., 1969, v. 184, p. 1486.
348. Желобенко Д. П. — ДАН СССР, 1959, т. 126, с. 935.
349. Гинзбург В. Л., Силин В. П. — ЖЭТФ, 1954, т. 27, с. 116.
350. Johnson M. H., Lippmann V. A. — Phys. Rev., 1950, v. 76 p. 828; 1950, v. 77, p. 702.
351. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Релятивистская квантовая теория. — М.: Наука, 1968, ч. I.
352. Фок В. А. — Sowjet. Phys., 1937, № 12, p. 404; Изв. АН СССР, сер. физ., 1937, № 4—5, с. 551.
353. Фок В. А. Работы по квантовой теории поля. — Л.: Изд-во ЛГУ, 1957.
354. Schwinger J. — Phys. Rev., 1951, v. 82, p. 664.
355. Nambu Y. — Progr. Theor. Phys., 1949, v. 76, p. 1180.
356. Dodonov V. V., Malkin I. A., Man'ko V. I. — Preprint PhIAN, 1977, № 70.
357. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. — М.: Наука, 1966.
358. Tables of Integral Transforms/Ed. A. Erdelyi — New York: McGraw-Hill, 1954, v. 1.
359. Малкин И. А., Манько В. И. — Ядерная физика, 1968, т. 8, с. 1264.
360. Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика. — М.: Наука, 1969.
361. Ритус В. И. Автореферат докт. дисс. — М.: ФИАН СССР, 1969.
362. Brown L. S., Kibble T. W. — Phys. Rev., 1964, v. 133, p. 705.
363. Redmond P. J. — J. Math. Phys., 1965, v. 6, p. 1163.
364. Олейник В. П. — Укр. физ. ж., 1968, т. 13, с. 1205; 1970, т. 14, с. 190.
365. Баталин И. А., Фрадкин Е. С. — ТМФ, 1970, т. 5, с. 190.
366. Додонов В. В., Малкин И. А., Манько В. И. — Препринт ФИАН СССР, 1975, № 60; Physica, 1976, v. 82A, p. 113; J. Phys., 1976, v. A19, p. 1791.
367. Багров В. Г., Бухбиндер И. Л., Гитман Д. М. — Изв. вузов, Физика, 1975, № 8, с. 134; J. Phys., 1976, v. A9, p. 1955.
368. Боргарт А. А., Карпенко Д. Я. — Укр. физ. ж., 1974, т. 19, с. 227; 1975, т. 20, с. 566.
369. Нарожный Н. Б., Никушов А. И. — ТМФ, 1976, т. 26, с. 16.

370. *Dirac P. A. M.*— Rev. Mod. Phys., 1949, v. 21, p. 392.
 371. *Судаков В. В.*— ЖЭТФ, 1956, т. 30, с. 87.
 372. *Горшков В. И.*— УФН, 1973, т. 110, с. 45.
 373. *Грибов В. Н.*— ЖЭТФ, 1967, т. 53, с. 654.
 374. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория поля.— М.: Наука, 1973.
 375. *Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике.— М.: Наука, 1962.
 376. *Боголюбов Н. Н.*— Изв. АН СССР, сер. физ., 1947, т. 11, с. 77; Nuovo Cimento, 1958, № 7, p. 794.
 377. *Valatin J. G.*— Nuovo Cimento, 1958, v. 7, p. 843.
 378. *Боголюбов Н. Н., Толмачев В. В., Ширков Д. В.* Новый метод в теории сверхпроводимости.— М.: Изд-во АН СССР, 1958.
 379. *Танabe К.*— J. Math. Phys., 1973, v. 14, p. 618.
 380. *Witschel W.*— Zs. f. Physik, 1975, Bd. B21, S. 313.
 381. *Aronson E. B., Malkin I. A., Man'ko V. I.*— Lett. Nuovo Cimento, 1974, v. 11, p. 44.
 382. *Bonifacio R., Kim D. M., Skully M. O.*— Phys. Rev., 1969, v. 187, p. 444.
 383. *Atkins P. W., Dobson J. C.*— Proc. Roy. Soc., 1971, v. A321, p. 321.
 384. *Mikhailov V. V.*— Phys. Lett., 1971, v. 34A, p. 343.
 385. *Махвиладзе Т. М., Шеленин Л. А.*— Ядерная физика, 1972, т. 15, с. 1082.
 386. *Reicke F., Rademacher H.*— Zs. f. Physik, 1926, Bd. 39, S. 444.
 387. *Kronig R., Rabi I. I.*— Phys. Rev., 1927, v. 29, p. 262.
 388. *Edmonds A. R.* Angular Momentum in Quantum Mechanics.— New York: Princeton, 1957.
 389. *Янсен Д.*— Препринт ОИЯИ, 1976, P4-9547.
 390. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Механика.— М.: Наука, 1973.
 391. *Doktorov E. V., Malkin I. A., Man'ko V. I.*— Preprint PhIAN, 1977, № 14.
 392. *Doktorov E. V., Malkin I. A., Man'ko V. I.*— Int. J. Quant. Chem., 1975, v. 9, p. 951.
 393. *Schwinger J.* Quantum Theory of Angular Momentum/Eds L. Biedenharn and H. Van Dam. N. Y. A. P., 1965.
 394. *Brussard P. J., Tolhoek H. A.*— Physica, 1957, v. 23, p. 955.
 395. *Corio P. L.*— Int. J. Quant. Chem., 1972, v. 6, p. 289.
 396. *Martin A.*— Preprint, TH-2199-CERN, 1976.
 397. *Евграфов М. А., Постников М. М.*— Математический сборник, 1970, т. 82, № 1.
 398. *Лаврентьев М. А., Шабат Б. В.*, Методы теории функций комплексного переменного.— М.: Физматгиз, 1958.
 399. *Федорюк М. В.*, Метод перевала.— М.: Наука, 1977.
 400. *Феллер В.* Введение в теорию вероятности и ее приложения.— М.: ИЛ, 1964.
 401. *Картан Э.* Интегральные инварианты.— М.: Гостехиздат, 1940, с. 108.
 402. *Арнольд В. И.* Математические методы классической механики.— М.: Наука, 1974.
 403. *Гурса Э.* Курс математического анализа.— М.: ГТТИ, 1933, т. 2, ч. 2, с. 102.
 404. *Овсянников Л. В.* Групповые свойства дифференциальных уравнений.— М.: Изд-во СО АН СССР, 1962; Групповой анализ дифференциальных уравнений.— М.: Наука, 1978.
 405. *Липкин Г.* Квантовая механика.— М.: Мир, 1977.

Литература к Приложению

1. *Чеботарев Н. Г.* Теория групп Ли.— М.: Гостехиздат, 1940.
2. *Понтрягин Л. С.* Непрерывные группы.— М.: Гостехиздат, 1954.
3. *Шевалле К.* Теория групп Ли.— М.: ИЛ, 1948, 1958, тт. 1—3.
4. *Серр Ж. П.* Алгебры Ли и группы Ли.— М.: Мир, 1969.

5. Теория алгебр Ли. Топология групп Ли. Семинар «Софус Ли». — М.: ИЛ, 1962.
6. *Джекобсон Н.* Алгебры Ли. — М.: Мир, 1964.
7. *Бурбаки Н.* Группы и алгебры Ли. — М.: Мир, 1972, 1976, 1978.
8. *Диксмье Ж.* Универсальные обертывающие алгебры. — М.: Мир, 1978.
9. *Желобенко Д. П.* Компактные группы Ли и их представления. — М.: Наука, 1970; Лекции по теории групп Ли. — Дубна, 1965; Гармонический анализ на полупростых комплексных группах Ли. — М.: Наука, 1974.
10. *Наймарк М. А.* Теория представлений групп. — М.: Наука, 1976.
11. *Вейль Г.* Классические группы, их инварианты и представления. — М.: ИЛ, 1947.
12. *Мурнаган Ф.* Теория представлений групп. — М.: ИЛ, 1950.
13. *Халермеш М.* Теория групп. — М.: Мир, 1966.
14. *Картан Э.* Теория спиноров. — М.: ИЛ, 1947.
15. *Хелгасон С.* Дифференциальная геометрия и симметрические пространства. — М.: Мир, 1964.
16. *Хуа Ло-кен.* Гармонический анализ функции многих комплексных переменных в классических областях. — М.: ИЛ, 1959.
17. *Гельфанд И. М., Граев М. И., Виленкин Н. Я.* Интегральная геометрия и связанные с ней вопросы теории представлений. — М.: Физматгиз, 1962.
18. *Гельфанд И. М., Граев М. И., Пятацкий-Шапиро И. И.* Теория представлений и автоморфные функции. — М.: Наука, 1966.
19. *Хариш-Чандра.* Автоморфные формы на полупростых группах Ли. — М.: Мир, 1971.
20. Арифметические группы и автоморфные функции. — М.: Мир, 1969.
21. *Гельфанд И. М., Минлос Р. А., Шапиро З. Я.* Представления группы вращений и группы Лоренца. — М.: Физматгиз, 1958.
22. *Юцис А. П., Левинсон И. Б., Ванагас В. В.* Математический аппарат теории момента количества движения. — Вильнюс, 1960.
23. *Эльбаз Э., Кастель Б.* Графические методы алгебры спинов. — М.: Мир, 1974.
24. *Варшавович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К.* Квантовая теория углового момента. — Л.: Наука, 1975.
25. *Каплан И. Г.* Симметрия многоэлектронных систем. — М.: Наука, 1969.
26. *Петрашень М. И., Трифонов Е. Д.* Применения теории групп в квантовой механике. — М.: Наука, 1967.
27. *Любарский Г. Я.* Теория групп и ее применения в физике. — М.: Физматгиз, 1958.
28. *Бейгман Б. Ф.* Лекции по применению теории групп в ядерной спектроскопии. — М.: Физматгиз, 1961.
29. *Хейне В.* Теория групп в квантовой механике. — М.: ИЛ, 1963.
30. Теоретико-групповые методы в физике. — Труды ФИАН СССР, 1973, т. 70.
31. *Виленкин Н. Я.* Специальные функции и теория представлений групп. — М.: Наука, 1965.
32. *Кострикин И. И.* Введение в алгебру. — М.: Наука, 1977.
33. *Гельфанд И. М.* Лекции по линейной алгебре. — М.: Наука, 1966.
34. *Шилов Г. Е.* Математический анализ (конечномерные линейные пространства). — М.: Наука, 1969.
35. *Гельфанд И. М.* Математический сборник, 1950, т. 26, е. 103.
36. *Миси М.* — Nucl. Phys., 1964, v. 60, p. 353.
37. *Лезнов А. Н., Малкин И. А., Манько В. И.* — Труды ФИАН СССР, 1977, т. 96, с. 24.
38. *Переломов А. М., Попов В. С.* — Изв. АН СССР, сер. мат., 1968, т. 32, с. 1368.
39. *Березин Ф. А.* — Функциональный анализ и его приложения, 1967, т. 1, с. 1.