

В.Г. Багров, В.В. Белов, А.Ю. Трифонов

# МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Асимптотические методы

Учебники Томского политехнического университета

ИЗДАТЕЛЬСТВО  ТПУ

Федеральное агентство по образованию  
Государственное образовательное учреждение высшего  
профессионального образования  
Томский политехнический университет  
Томский государственный университет  
Институт естественных наук и экологии (Курчатовский РНЦ)  
Московский государственный институт электроники и математики  
(технический университет)

---

*В. Г. Багров, В. В. Белов, А. Ю. Трифонов*

## МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Асимптотические методы

*Учебное пособие*

Допущено Учебно-методическим объединением по образованию в области прикладной математики и управления качеством в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений, обучающихся по специальности 073000 – Прикладная математика

Издательство ТПУ

Томск 2005

УДК 581

Б15

**Б15 Багров В. Г., Белов В. В., Трифонов А. Ю.**

Методы математической физики. Асимптотические методы:  
Учебное пособие. — Томск: Изд-во ТПУ, 2005. — 166 с.

Настоящее пособие представляет собой дополнительные главы курса «Методы математической физики» и содержит материал по специальным разделам этого курса: методу канонического оператора Маслова; комплексному методу ВКБ-Маслова и его приложениям к квантовой механике. Предлагаемое пособие может быть полезно студентам старших курсов, магистрантам и аспирантам, специализирующимся в области теоретической и математической физики.

УДК 581

Рекомендовано к печати Редакционно-издательским советом  
Томского политехнического университета

*Рецензенты*

Доктор физико-математических наук, профессор Томского государственного педагогического университета, г. Томск  
*Бухбиндер И.Л.*

Доктор физико-математических наук, профессор Томского государственного университета, г. Томск  
*Шапалов А.В.*

© В.Г. Багров, В.В. Белов, А.Ю. Трифонов, 2005  
© Томский политехнический университет, 2005  
© Оформление. Издательство ТПУ, 2005

## Содержание

Глава 1. Метод канонического оператора для одномерного уравнения Шрёдингера	5
1. Квазиклассическое приближение в задаче Коши	5
2. Построение квазиклассических асимптотик нестационарного одномерного уравнения Шрёдингера	10
3. Задача Коши для свободного одномерного уравнения Шрёдингера	19
3.1. ВКБ-ответ . . . . .	20
3.2. Геометрическая интерпретация . . . . .	23
3.3. Решение в целом . . . . .	27
4. Квазиклассическая асимптотика для стационарного одномерного уравнения Шрёдингера	33
5. Сшивание локальных асимптотик. Квантование замкнутых кривых	37
6. Канонический оператор (одномерный случай)	41
7. Квазиклассическое представление	45
Глава 2. Квазиклассически сосредоточенные состояния уравнения Шрёдингера	48
8. Класс траекторно сосредоточенных функций	48
9. Квазиклассические асимптотики с комплексными фазами для нестационарного уравнения Шрёдингера	54
10. Система в вариациях	57
11. Квазиклассические траекторно-когерентные состояния	66
12. Производящая функция для квазиклассических ТКС	72
13. Многомерные полиномы Эрмита	76
14. Функция Грина задачи Коши для уравнения Шрёдингера с квадратичным гамильтонианом	78
15. Асимптотики и формула Дюамеля	81
16. Конструкция квазиклассических ТКС уравнения Шрёдингера	83
17. Квазиклассическая функция Грина задачи Коши в пространстве траекторно сосредоточенных функций	86
18. Квазиклассические ТКС в электромагнитных полях специального вида	87
18.1. Квазиклассические ТКС квадратичных систем . . . . .	87
18.2. Оператор унитарной эквивалентности . . . . .	89
18.3. Квазиклассические ТКС нерелятивистской заряженной частицы в постоянном и однородном магнитном поле . . . . .	90
18.4. Квазиклассические ТКС нерелятивистской заряженной частицы в постоянном и однородном электрическом поле . . . . .	92
19. Квазиклассическая сосредоточенность состояний и вывод классических уравнений движения из квантовой теории	93
20. Уравнения Гамильтона–Эренфеста для квантовых средних	102
20.1. Система Гамильтона–Эренфеста для упорядоченных по Вейлю операторов . . . . .	102
20.2. Система Гамильтона–Эренфеста, не содержащая постоянную Планка . . . . .	104
20.3. Система Гамильтона–Эренфеста: приближение малых дисперсий .	106
21. Гамильтоновость системы уравнений для квантовых средних	106
22. Энергетический спектр и система уравнений для квантовых средних	112
Глава 3. Квазиклассически сосредоточенные состояния уравнения Шрёдингера и геометрические фазы	120
23. Системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с периодическими коэффициентами	120

24. Квазиклассическая асимптотика систем обыкновенных дифференциальных уравнений	124
25. Конструкция квазиэнергетических спектральных серий оператора Шрёдингера, отвечающих устойчивым циклическим движениям классической системы	128
26. Фаза Ааронова–Ананда	132
27. Фаза Ааронова–Ананда в адиабатическом приближении	134
28. Квазиэнергетические спектральные серии и фаза Ааронова–Ананда квантовых систем специального вида	138
Глава 4. Квазиклассические спектральные серии оператора Шрёдингера	142
29. Пространство функций, квазиклассически сосредоточенных на замкнутых траекториях	142
30. Асимптотические решения уравнения Шрёдингера	145
31. Семейства замкнутых фазовых кривых с комплексным ростком	147
32. Комплексный росток классических систем с одной циклической переменной	148
33. Стационарные траекторно-когерентные состояния	149
34. Условие квантования замкнутых орбит	151
Глава 5. Фаза Берри и квазиклассически сосредоточенные состояния	153
35. Квазиклассические спектральные серии, отвечающие нульмерным лагранжевым торам $\Lambda^0(R)$	153
36. Траекторно-когерентные состояния и адиабатическая фаза Берри	155
36.1. Постановка задачи . . . . .	155
36.2. Адиабатическая эволюция классической системы . . . . .	156
36.3. Фаза Берри . . . . .	159
37. Фаза Берри для обобщенного гармонического осциллятора	161
38. Фаза Берри релятивистской заряженной частицы во внешнем периодическом электромагнитном поле	161
Список литературы	163



## Введение

Точно решаемые задачи математической физики составляют её «золотой фонд», особенно с дидактической и педагогической точек зрения. Однако все задачи, имеющие отношение к практическим приложениям, особенно инженерным, как правило, не только не допускают в явном виде точных решений, но и весьма трудоёмки при приближенном рассмотрении даже с использованием современной вычислительной техники. Поэтому проблема разработки различных асимптотических методов решения задач математической физики всегда являлась предметом повышенного интереса математиков, физиков-теоретиков и инженеров-исследователей.

Среди приближенных методов решения задач математической физики заметное место занимают так называемые асимптотические методы. Например, зачастую нас не интересуют детали, может быть весьма сложные, какого-то процесса, а важен его конечный результат. В этом случае особый интерес представляют не столько точные (и сложные) математические формулы, этот процесс описывающие, а их предельные (как правило, гораздо более простые) выражения, соответствующие, например, большим временам или предельным значениям каких-то параметров.

В современной математической физике разработаны разнообразные специальные методы получения приближенных решений, получившие название асимптотических. Особое развитие эти методы получили в процессе создания квантовой механики и квантовой теории поля. Это было связано с тем, с одной стороны, что многие задачи в этих разделах физики допускали сравнительно простые асимптотические решения, и, с другой стороны, что сами творцы квантовой теории внесли решающий вклад в соответствующие разделы математики.

В настоящее время асимптотические методы представляют собой обширную область математики, весьма хорошо отраженную в специальных монографиях. Однако учебная литература по этому разделу математической физики достаточно бедна, большинство немногочисленных учебных пособий устарело и не отражает современный уровень этой области науки. Авторы попытались в предлагаемом пособии частично восполнить этот пробел. В качестве основной иллюстрации применения математической техники асимптотических методов авторы выбрали простейшие задачи квантовой теории, которые, кроме дидактического и педагогического, представляют и некоторый самостоятельный научный интерес как для самой математической физики, так и для ее приложений.

В тексте пособия используется сплошная нумерация параграфов. При нумерации формул, теорем и лемм из данной части первое число указывает номер параграфа, а второе — порядковый номер формулы, теоремы, леммы. При нумерации следствий из теорем и лемм первое число указывает номер параграфа, второе — номер теоремы или леммы в этом параграфе и третье — номер собственно следствия. Для обозначения определений и замечаний нами используются символы  $\blacklozenge$  и  $\blacklozenge$ , соответственно.

Авторы признательны всем сотрудникам кафедры высшей математики и математической физики Томского политехнического университета и кафедры прикладной математики Московского института электроники и математики, кафедр теоретической физики и квантовой теории поля Томского государственного университета и особенно А.В. Шаповалову за полезные обсуждения и замечания. Мы благодарны всем аспирантам и студентам, обратившим наше внимание на неточности и опечатки, особенно А.Л. Лиску и Ф.Н. Литвинцу, и А.Н. Романову, оказавшему помощь в оформлении отдельных разделов лекций.

## ГЛАВА 1

# Метод канонического оператора для одномерного уравнения Шрёдингера

### 1. Квазиклассическое приближение в задаче Коши

Рассмотрим квантовую систему, описываемую уравнением Шрёдингера

$$\{-i\hbar\partial_t + \hat{\mathcal{H}}(t)\}\Psi = 0, \quad (1.1)$$

где самосопряженный в  $L_2(\mathbb{R}_x^n)$  оператор Гамильтона

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \mathcal{H}(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{x}}, t) \quad (1.2)$$

есть функция от некоммутирующих канонических переменных  $\hat{x}_k, \hat{p}_s, k, s = \overline{1, n}$ :

$$[\hat{x}_k, \hat{p}_s] = i\hbar\delta_{ks} \quad (1.3)$$

с заданным порядком действия операторов  $\hat{p}_s = -i\hbar\partial/\partial x_s, \hat{x}_k = x_k$ . Для определенности будем использовать упорядочение по Вейлю [19] (см. также [5]). В этом случае

$$\hat{\mathcal{H}}(t)\Psi(\vec{x}, t, \hbar) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} d\vec{y}d\vec{p} e^{\frac{i}{\hbar}\langle(\vec{x}-\vec{y}), \vec{p}\rangle} \mathcal{H}\left(\vec{p}, \frac{\vec{x} + \vec{y}}{2}, t\right) \Psi(\vec{y}, t, \hbar). \quad (1.4)$$

Здесь предполагается, что вейлевский символ  $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{x}, t)$  оператора  $\hat{\mathcal{H}}(t)$  есть гладкая функция всех своих аргументов и растет равномерно по  $t$  вместе со всеми своими производными по  $\vec{x}$  и  $\vec{p}$  при  $|\vec{p}| \rightarrow \infty, |\vec{x}| \rightarrow \infty$  не быстрее, чем некоторая степень  $|\vec{p}|$  и  $|\vec{x}|$ .

Решение уравнения (1.1) будем искать в виде регулярного разложения по малому параметру  $\hbar$ :

$$\Psi(\vec{x}, t, \hbar) = \Psi^{(0)}(\vec{x}, t) + \hbar\Psi^{(1)}(\vec{x}, t) + \hbar^2\Psi^{(2)}(\vec{x}, t) + \dots \quad (1.5)$$

◆ Будем говорить, что функция  $\Psi(\vec{x}, t, \hbar) \in \mathcal{D}_0$ , если  $\Psi$  регулярно зависит от  $\hbar$  и  $\Psi \in \mathbb{S}$  равномерно по  $t$ , где  $\mathbb{S}$  — пространство Шварца по переменной  $\vec{x}$ .

Заметим, что для функций, регулярно зависящих от  $\hbar$ , справедливы следующие асимптотические оценки:

$$x_k = \hat{O}(1), \quad \hat{p}_k = \hat{O}(\hbar), \quad -i\hbar\partial_t = \hat{O}(\hbar). \quad (1.6)$$

Здесь под  $\hat{O}(\hbar^\alpha)$  понимается оператор  $\hat{F}$  такой, что на классе функций  $\mathcal{D}_0$  справедливо

$$\frac{\|\hat{F}\Psi\|}{\|\Psi\|} = O(\hbar^\alpha), \quad \Psi \in \mathcal{D}_0, \quad \hbar \rightarrow 0 \quad (1.7)$$

для всех  $\Psi$ , принадлежащих  $\mathcal{D}_0$ .

Справедливость оценок (1.6) очевидна. Так, для оператора  $\hat{p}_k$  имеем

$$\frac{\|\hat{p}_k\Psi\|}{\|\Psi\|} = \hbar^1 \frac{\|\partial\Psi/\partial x_k\|}{\|\Psi\|} = O(\hbar)$$

и т.д.

Подставим (1.5) в (1.1) и приравняем коэффициенты при одинаковых степенях  $\hbar$ . Получим

$$\hbar^0 : \quad \mathcal{H}(0, \vec{x}, t)\Psi^{(0)} = 0, \quad (1.8)$$

$$\begin{aligned} \hbar^1 : \quad & \mathcal{H}(0, \vec{x}, t)\Psi^{(1)} + (-i)\left\{\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2}\langle \mathcal{H}_{\vec{p}}(0, \vec{x}, t), \nabla \rangle + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2}\langle \nabla, \mathcal{H}_{\vec{p}}(0, \vec{x}, t) \rangle\right\}\Psi^{(0)} = 0, \end{aligned} \quad (1.9)$$

$$\begin{aligned} \hbar^2 : \quad & \mathcal{H}(0, \vec{x}, t)\Psi^{(2)} + (-i)\left\{\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2}\langle \mathcal{H}_{\vec{p}}(0, \vec{x}, t), \nabla \rangle + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2}\langle \nabla, \mathcal{H}_{\vec{p}}(0, \vec{x}, t) \rangle\right\}\Psi^{(1)} - \frac{1}{2}\langle \nabla, \mathcal{H}_{pp}(0, \vec{x}, t)\nabla \rangle\Psi^{(0)} = 0, \end{aligned} \quad (1.10)$$

.....

Здесь символом  $\langle , \rangle$  обозначено евклидово скалярное произведение векторов, а символом  $( , )$  – эрмитово скалярное произведение векторов

$$\langle \vec{a}, \vec{b} \rangle = \sum_{j=1}^n a_j b_j, \quad (\vec{a}, \vec{b}) = \sum_{j=1}^n a_j^* b_j.$$

Из уравнения (1.8) мы находим  $\Psi^{(0)} = 0$ . Продолжив эту процедуру, найдем

$$\Psi^{(j)}(\vec{x}, t) = 0, \quad j = \overline{0, \infty}.$$

Таким образом, только тривиальное решение может регулярно зависеть от  $\hbar$ .

Решение задачи Коши для уравнения (1.1) с начальным условием

$$\Psi|_{t=0} = e^{\frac{i}{\hbar}S_0(\vec{x})} f_0(\vec{x}, \hbar) \quad (1.11)$$

будем искать в виде

$$\Psi(\vec{x}, t, \hbar) = e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{x}, t)} f(\vec{x}, t, \hbar), \quad (1.12)$$

где  $S(\vec{x}, t)$  — вещественно-значная функция, а предэкспонента  $f(\vec{x}, t, \hbar) \in \mathcal{D}_0$ , т.е. регулярно зависит от  $\hbar$ :

$$f(\vec{x}, t, \hbar) = f^{(0)}(\vec{x}, t) + \hbar f^{(1)}(\vec{x}, t) + \dots \quad (1.13)$$

Подставим (1.12) в (1.1) и разделим обе части получившегося равенства на экспоненту. В результате для определения функции  $f(\vec{x}, t, \hbar)$  получим уравнение

$$\{\mathcal{H}(\nabla S - i\hbar\nabla, \vec{x}, t) - i\hbar\partial_t + S_t\}f = 0. \quad (1.14)$$

Разложим оператор, стоящий в левой части уравнения (1.14), в ряд Тейлора по  $\hbar$  с учетом оценок (1.6), справедливых на классе  $\mathcal{D}_0$ , и приравняем коэффициенты при одинаковых степенях  $\hbar$ . С учетом (1.13) получим

$$\begin{aligned} \{S_t + \mathcal{H}(\nabla S, \vec{x}, t)\}f^{(0)} &= 0, \\ \{S_t + \mathcal{H}(\nabla S, \vec{x}, t)\}f^{(1)} - \\ -i\left\{\partial_t + \frac{1}{2}\langle \mathcal{H}_{\vec{p}}(\nabla S, \vec{x}, t), \nabla \rangle + \frac{1}{2}\langle \nabla, \mathcal{H}_{\vec{p}}(\nabla S, \vec{x}, t) \rangle\right\}f^{(0)} &= 0, \\ \dots \dots \dots \end{aligned} \quad (1.15)$$

Из первого уравнения системы (1.15) для функции  $S(\vec{x}, t)$  запишем

$$S_t + \mathcal{H}(\nabla S, \vec{x}, t) = 0, \quad S|_{t=0} = S_0(\vec{x}), \quad (1.16)$$



тогда из второго уравнения для амплитуды  $f^{(0)}(\vec{x}, t)$  имеем

$$\left\{ \partial_t + \langle \mathcal{H}_{\vec{p}}(\nabla S, \vec{x}, t), \nabla \rangle + \frac{1}{2} \text{Sp} [\mathcal{H}_{px}(\nabla S, \vec{x}, t) + \mathcal{H}_{pp}(\nabla S, \vec{x}, t) S''_{xx}] \right\} f^{(0)} = 0, \quad (1.17)$$

$$f^{(0)}|_{t=0} = f_0^{(0)}(\vec{x}), \quad S''_{xx} = \left\| \frac{\partial^2 S}{\partial x_j \partial x_k} \right\|_{n \times n}.$$

◆ Уравнение (1.16) называется *уравнением Гамильтона–Якоби*, а (1.17) — *уравнением переноса*.

Решение задачи Коши (1.16) имеет вид (см. разд. «Уравнения Гамильтона–Якоби» [4, 5])

$$S(\vec{x}, t) = S(t, \vec{\alpha})|_{\vec{\alpha}=\vec{A}(\vec{x}, t)}, \quad (1.18)$$

где

$$S(t, \vec{\alpha}) = \left\{ S_0(\vec{\alpha}) + \int_0^t [\langle \vec{P}(t, \vec{\alpha}), \dot{\vec{X}}(t, \vec{\alpha}) \rangle - \mathcal{H}(t)] dt \right\}, \quad (1.19)$$

а  $\vec{x} = \vec{X}(t, \vec{\alpha})$ ,  $\vec{p} = \vec{P}(t, \vec{\alpha})$  — решение задачи Коши

$$\dot{\vec{x}} = \mathcal{H}_{\vec{p}}(\vec{p}, \vec{x}, t), \quad \dot{\vec{p}} = -\mathcal{H}_{\vec{x}}(\vec{p}, \vec{x}, t), \quad (1.20)$$

$$\vec{x}|_{t=0} = \vec{\alpha}, \quad \vec{p}|_{t=0} = \frac{\partial S_0(\vec{\alpha})}{\partial \vec{\alpha}}.$$

Функция  $\vec{\alpha} = \vec{A}(\vec{x}, t)$  неявным образом определяется уравнением

$$\vec{X}(t, \vec{\alpha}) = \vec{x}. \quad (1.21)$$

Рассмотрим уравнение (1.17) вдоль траектории  $\vec{x} = \vec{X}(t, \vec{\alpha})$ . Тогда

$$\partial_t + \langle \mathcal{H}_{\vec{p}}(\nabla S, \vec{x}, t), \nabla \rangle = \frac{d}{dt}, \quad (1.22)$$

где  $d/dt$  — производная в силу системы Гамильтона (1.20) (при фиксированном  $\vec{\alpha}$ ). В результате получим

$$\left\{ \frac{d}{dt} + \frac{1}{2} \text{Sp} [\mathcal{H}_{px}(t) + \mathcal{H}_{pp}(t) S''_{xx}(t)] \right\} f^{(0)} = 0, \quad (1.23)$$

$$f^{(0)}|_{t=0} = f_0^{(0)}(\vec{\alpha}),$$

и, следовательно,

$$f^{(0)}(t, \vec{\alpha}) = f_0^{(0)}(\vec{\alpha}) \exp \left\{ \frac{1}{2} \int_0^t \text{Sp} [\mathcal{H}_{px}(t) + \mathcal{H}_{pp}(t) S''_{xx}(t)] dt \right\}.$$

**Лемма 1.1.** *Справедливо соотношение*

$$f^{(0)}(\vec{x}, t) = \frac{\sqrt{J(0, \vec{\alpha})}}{\sqrt{J(t, \vec{\alpha})}} f_0^{(0)}(\vec{\alpha})|_{\vec{\alpha}=\vec{A}(\vec{x}, t)}, \quad (1.24)$$

где  $\vec{A}(\vec{x}, t)$  определяется уравнением (1.21) и обозначено

$$J(t, \vec{\alpha}) = \det \left\| \frac{\partial X_i}{\partial \alpha_j} \right\|. \quad (1.25)$$

**Доказательство.** Обозначим

$$Y(t, \vec{\alpha}) = \left\| \frac{\partial X_j}{\partial \alpha_i} \right\|_{n \times n}. \quad (1.26)$$

Функция  $\vec{x} = \vec{X}(t, \vec{\alpha})$  удовлетворяет уравнению (см. формулу (3.8) [4])

$$\dot{\vec{x}} = \mathcal{H}_{\vec{p}}(\nabla S, \vec{x}, t),$$

а  $S(\vec{x}, t)$  определяется соотношением (1.18). Продифференцируем это уравнение по  $\alpha_j$  и получим

$$\frac{\partial \dot{\vec{X}}}{\partial \alpha_j} = \mathcal{H}_{pp}(\nabla S, \vec{x}, t) S''_{xx} \frac{\partial \vec{X}}{\partial \alpha_j} + \mathcal{H}_{px}(\nabla S, \vec{x}, t) \frac{\partial \vec{X}}{\partial \alpha_j}.$$

Следовательно, матрица  $Y(t, \vec{\alpha})$  удовлетворяет уравнению

$$\dot{Y} - [\mathcal{H}_{pp}(\nabla S, \vec{x}, t) S''_{xx} + \mathcal{H}_{px}(\nabla S, \vec{x}, t)] Y = 0. \quad (1.27)$$

Согласно лемме Лиувилля, определитель матрицы  $Y(t, \vec{\alpha})$  удовлетворяет уравнению

$$\frac{d}{dt} J(t, \vec{\alpha}) - J(t, \vec{\alpha}) \text{Sp} [\mathcal{H}_{pp} S''_{xx} + \mathcal{H}_{px}] = 0, \quad (1.28)$$

где обозначено  $J(t, \alpha) = \det Y(t, \alpha)$ . Сделав в уравнении (1.23) замену

$$f^{(0)}(t, \vec{\alpha}) = \frac{1}{\sqrt{J(t, \vec{\alpha})}} \varphi(\vec{\alpha}),$$

с учетом (1.26) получим

$$\frac{d}{dt} \varphi(\vec{\alpha}) = 0$$

и, следовательно, из начальных условий (1.23) найдем  $\varphi(\vec{\alpha}) = f_0^{(0)}(\vec{\alpha})$ .

◇ Формула

$$\Psi^{(0)}(\vec{x}, t, \hbar) = \sqrt{\frac{J(0, \vec{\alpha})}{J(t, \vec{\alpha})}} f_0^{(0)}(\vec{\alpha}) e^{\frac{i}{\hbar} S(t, \vec{\alpha})} \Big|_{\vec{\alpha}=\vec{A}(\vec{x}, t)} \quad (1.29)$$

определяет формальное асимптотическое решение уравнения (1.1) с точностью до  $O(\hbar^2)$ , т.е.

$$\{ -i\hbar \partial_t + \hat{\mathcal{H}}(t) \} \Psi^{(0)} = O(\hbar^2). \quad (1.30)$$

Из этой формулы следует, что главный член асимптотики полностью определяется решением задачи Коши (1.20) для системы Гамильтона.

**Пример 1.1.** Первый член квазиклассической асимптотики ( $\hbar \rightarrow 0$ ) решения задачи Коши для уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\vec{q}, t) \Psi, \quad \Psi|_{t=0} = e^{iS_0(\vec{q})/\hbar}$$

имеет вид

$$\Psi^{(0)}(\vec{q}, t) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(\vec{q}, t) \right\} |J(\vec{q}, t)|^{-1/2} \varphi_0(\vec{A}(\vec{q}, t)).$$

Показать, что функция  $\rho(\vec{q}, t) = J^{-1}(\vec{q}, t)$  удовлетворяет уравнению неразрывности в поле скоростей  $\vec{v} = \text{grad } S$ :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{v}) = 0, \quad \vec{v} = \nabla S(\vec{q}, t).$$

**Решение.** Пусть  $q_i = Q_i(t, \vec{\alpha})$ ,  $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ , —  $n$ -параметрическое семейство решений системы обыкновенных дифференциальных уравнений  $\dot{q}_i = f_i(t, q_1, \dots, q_n)$ ,  $i = \overline{1, n}$ . Тогда по лемме Соболева якобиан

$$J(t, \vec{q}) = \frac{\partial \vec{Q}(t, \vec{\alpha})}{\partial \vec{\alpha}} \Big|_{\vec{\alpha} = \vec{A}(\vec{q}, t)}$$

удовлетворяет уравнению

$$\frac{d}{dt} J = J \operatorname{div} \vec{f}(\vec{q}, t) \quad (1.31)$$

в области

$$\Omega = \left\{ \vec{q} = \vec{Q}(t, \vec{\alpha}), \quad \vec{\alpha} \in \mathbb{R}^n, \quad 0 < t < T, \quad \frac{\partial \vec{Q}(t, \vec{\alpha})}{\partial \vec{\alpha}} \neq 0 \right\}.$$

Записав в явном виде оператор дифференцирования

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \langle \dot{\vec{Q}}, \nabla_q \rangle$$

вдоль траекторий  $\vec{q} = \vec{Q}(t, \vec{\alpha})$  и умножив обе части равенства (1.31) на  $1/J^2$ , получим соотношение

$$\frac{1}{J^2} \frac{\partial J}{\partial t} + \frac{1}{J^2} \langle \dot{\vec{Q}}, \nabla J \rangle = \frac{1}{J} \operatorname{div}_q \vec{f}. \quad (1.32)$$

Отсюда следует равенство

$$-\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{J} \right) - \langle \dot{\vec{Q}}, \nabla \frac{1}{J} \rangle = \frac{1}{J} \operatorname{div}_q \vec{f}(\vec{q}, t). \quad (1.33)$$

Воспользовавшись формулой векторного анализа

$$\operatorname{div}(\varphi \vec{a}) = \langle \vec{a}, \nabla \varphi \rangle + \varphi \operatorname{div} \vec{a}$$

и уравнениями определяющими траектории

$$\dot{q}_i = f_i(\vec{q}, t), \quad i = \overline{1, n},$$

легко преобразовать (1.33) к требуемому виду.

Полученные выше результаты могут быть применены не только к уравнению Шрёдингера, что мы и проиллюстрируем следующими примерами.

**Пример 1.2.** Для описания поведения бесспиновых микрочастиц в отсутствие внешних полей в релятивистской квантовой механике используют уравнение Клейна–Гордона–Фока

$$\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \hbar^2 \Delta \Psi - m^2 c^2 \Psi.$$

Найти первый член асимптотического разложения при  $\hbar \rightarrow 0$  решения этого уравнения, удовлетворяющего начальным данным

$$\Psi|_{t=0} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \langle \vec{p}_0, \vec{q} \rangle\right), \quad \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Big|_{t=0} = 0, \quad \vec{p}_0, \vec{q} \in \mathbb{R}^3.$$

**Решение.** Аналогично (1.16) в старшем порядке по  $\hbar$ , получим уравнение

$$\frac{1}{c^2} \left( \frac{\partial S}{\partial t} \right)^2 = \left( \frac{\partial S}{\partial \vec{q}} \right)^2 + m^2 c^2,$$

которое распадается на два эволюционных уравнения Гамильтона–Якоби:

$$\frac{\partial S^{(+)}}{\partial t} + c \sqrt{\left( \frac{\partial S^+}{\partial \vec{q}} \right)^2 + m^2 c^2} = 0, \quad (1.34)$$

$$\frac{\partial S^{(-)}}{\partial t} - c \sqrt{\left( \frac{\partial S^-}{\partial \vec{q}} \right)^2 + m^2 c^2} = 0, \quad (1.35)$$

Решение ищем в виде

$$\Psi(\vec{q}, t, \hbar) = \varphi^{(+)}(\vec{q}, t) e^{iS^{(+)}(\vec{q}, t)/\hbar} + \varphi^{(-)}(\vec{q}, t) e^{iS^{(-)}(\vec{q}, t)/\hbar}.$$

Из начальных условий для исходной задачи имеем

$$S^{(\pm)}|_{t=0} = \langle \vec{p}_0, \vec{q} \rangle. \quad (1.36)$$

Траектории  $\vec{q} = \vec{Q}^{(\pm)}(t, \vec{\alpha})$  гамильтоновых систем, отвечающих функциям Гамильтона

$$\mathcal{H}^{(\pm)}(\vec{p}, \vec{q}) = \pm c \sqrt{p^2 + m^2 c^2},$$

имеют вид

$$\vec{Q}^{(\pm)}(t, \vec{\alpha}) = \vec{\alpha} \pm \frac{c\vec{p}_0 t}{\sqrt{p_0^2 + m^2 c^2}}.$$

Разрешив последнее уравнение относительно  $\vec{\alpha}$ , получим

$$\vec{A}^{(\pm)}(\vec{q}, t) = \vec{q} \mp \frac{c\vec{p}_0 t}{\sqrt{p_0^2 + m^2 c^2}}.$$

В результате для решений уравнений (1.34), (1.35) при условии (1.36) запишем (см. [5])

$$S^{(\pm)}(\vec{q}, t) = \langle \vec{p}_0, \vec{q} \rangle \mp ct \sqrt{p_0^2 + m^2 c^2}.$$

Уравнения переноса («плотности вероятности»)

$$\frac{d\varphi^{(\pm)}}{d\tau} = \frac{\partial S^{(\pm)}}{\partial t} \frac{\partial \varphi^{(\pm)}}{\partial t} + \left\langle \frac{\partial S^{(\pm)}}{\partial \vec{q}}, \frac{\partial \varphi^{(\pm)}}{\partial \vec{q}} \right\rangle = 0$$

также легко интегрируются:

$$\varphi^{(\pm)}(\vec{q}, t) = \varphi_0^{(\pm)}(\vec{\alpha}) \Big|_{\vec{\alpha} = \vec{A}^{(\pm)}(\vec{q}, t)}.$$

Здесь функции  $\varphi_0^{(\pm)}(\vec{\alpha})$  находятся из системы уравнений

$$\varphi_0^+(\vec{\alpha}) + \varphi_0^-(\vec{\alpha}) = 1, \quad \varphi_0^+(\vec{\alpha}) - \varphi_0^-(\vec{\alpha}) = 0,$$

обеспечивающих справедливость начальных условий с максимально возможной точностью по  $\hbar$ . Для первого члена асимптотического разложения получаем формулу

$$\Psi(\vec{q}, t, \hbar) = e^{i\langle \vec{p}_0, \vec{q} \rangle / \hbar} \cos \left[ \frac{ct \sqrt{p_0^2 + m^2 c^2}}{\hbar} \right].$$

## 2. Построение квазиклассических асимптотик нестационарного одномерного уравнения Шрёдингера

Схему построения квазиклассических асимптотик, обоснованную в предыдущем разделе, подробно проиллюстрируем на примере нестационарного одномерного уравнения Шрёдингера. В этом случае можно в явном виде с любой степенью по  $\hbar$ ,  $\hbar \rightarrow 0$  провести все вычисления и оценить степень справедливости полученных формул.

Запишем одномерное уравнение Шрёдингера

$$\hat{L}_S \Psi = 0, \quad \hat{L}_S = -i\hbar \partial_t + \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x). \quad (2.1)$$

Приближенное (асимптотическое по  $\hbar \rightarrow 0$ ) решение этого уравнения будем искать в виде

$$\Psi(x, t, \hbar) = e^{iS(x)/\hbar} f(x, t, \hbar), \quad (2.2)$$

где  $f(x, t, \hbar) \in \mathcal{D}_0$  (см. разд. «Квазиклассическое приближение в задаче Коши»), т.е.

$$f(x, t, \hbar) = f^{(0)}(x, t) + \hbar f^{(1)}(x, t) + \dots \quad (2.3)$$

Подставим (2.2) в (2.1) и прокоммутируем экспоненту с оператором  $\hat{L}_S$ . Получим

$$e^{iS/\hbar} \left\{ S_t f + (-i\hbar) \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left[ \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + 2mV(x) - i\hbar \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right] f - i\hbar \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right\} = 0.$$

Подставив сюда разложение (2.3) и приравняв коэффициенты при одинаковых степенях  $\hbar$ , запишем

$$\begin{aligned} \hbar^0 : & \left[ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x) \right] f^{(0)} = 0, \\ \hbar^1 : & \left[ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x) \right] f^{(1)} - i \left( \partial_t + \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial x} \partial_x + \frac{1}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right) f^{(0)} = 0, \\ & \dots, \\ \hbar^k : & \left[ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x) \right] f^{(k)} - i \left( \partial_t + \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial x} \partial_x + \frac{1}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right) f^{(k-1)} - \frac{\partial^2 f^{(k-2)}}{2m \partial x^2} = 0. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Из первого уравнения

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x) = 0, \quad (2.5)$$

т.е. функция  $S(x)$  удовлетворяет уравнению Гамильтона–Якоби. Из оставшихся в (2.4) уравнений следует

$$\begin{aligned} & \left[ \partial_t + \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial x} \partial_x + \frac{1}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right] f^{(0)} = 0, \\ & \dots, \\ & \left[ \partial_t + \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial x} \partial_x + \frac{1}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right] f^{(k)} - \frac{i}{2m} \frac{\partial^2 f^{(k-1)}}{\partial x^2} = 0, \end{aligned} \quad (2.6)$$

где  $k = \overline{1, \infty}$ . Система (2.6) — рекуррентная цепочка уравнений переноса. Каждое последующее уравнение полностью определяется предыдущим.

Последовательно решив систему (2.6), можно получить любое наперед заданное количество слагаемых для функций (2.2), (2.3).

Поставим задачу Коши для уравнения (2.1):

$$\Psi|_{t=0} = e^{iS_0(x)/\hbar} [f_0^{(0)}(x) + \hbar f_0^{(1)}(x) + \dots], \quad (2.7)$$

где  $f_0^{(k)} \in \mathcal{D}_0$ . Начальные условия (2.7) приводят к следующим начальным условиям для уравнений (2.6):

$$S|_{t=0} = S_0(x), \quad f^{(k)}|_{t=0} = f_0^{(k)}(x), \quad k = \overline{0, \infty}. \quad (2.8)$$

Таким образом, получена задача Коши для системы уравнений в частных производных первого порядка. Решение такой задачи мы рассмотрели в разделе «Уравнения в частных производных первого порядка» [4].

Пусть

$$x = X(t, \alpha), \quad p = P(t, \alpha)$$

— решение системы Гамильтона

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{p}{m}, \\ \dot{p} = -V_x \end{cases} \quad (2.9)$$

с начальным условием

$$x|_{t=0} = \alpha, \quad p|_{t=0} = \frac{\partial S_0(\alpha)}{\partial \alpha}.$$

Будем предполагать, что уравнение

$$x = X(t, \alpha) \quad (2.10)$$

можно разрешить относительно переменной  $\alpha = A(x, t)$ . Тогда решение уравнения Гамильтона–Якоби имеет вид (см. разд. «Уравнения Гамильтона–Якоби» [4, 5])

$$S(x, t) = S(t, \alpha)|_{\alpha=A(x,t)}, \quad (2.11)$$

где

$$S(t, \alpha) = S_0(\alpha) + \int_0^t [P(t, \alpha)\dot{X}(t, \alpha) - \mathcal{H}(P(t, \alpha), X(t, \alpha))] dt.$$

Поскольку

$$x = X(t, \alpha), \quad \mathcal{H}(P(t, \alpha), X(t, \alpha)) = E,$$

то

$$S(x, t) = S_0(A(x, t)) + \int_{X(0, \alpha)}^{X(t, \alpha)} P(t, \alpha) dX(t, \alpha) \Big|_{\alpha=A(x,t)} - Et = S_0(A(x, t)) + \int_{x_0}^x \mathcal{P}(x) dx - Et,$$

где

$$\mathcal{P}(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]} = P(t, \alpha)|_{\alpha=A(x,t)}.$$

Обозначим через

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x}$$

оператор дифференцирования вдоль траекторий системы Гамильтона. С учетом соотношений

$$\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2}(X(t, \alpha), t) = \frac{1}{2} \frac{\dot{J}(t, \alpha)}{J(t, \alpha)} = \frac{d}{dt} \ln \sqrt{J(t, \alpha)},$$

где

$$J(t, \alpha) = \frac{\partial X(t, \alpha)}{\partial \alpha}.$$

Система уравнений переноса (2.6) примет вид

$$\begin{aligned} \frac{df^{(0)}}{dt} + f^{(0)} \frac{d}{dt} \ln \sqrt{J(t, \alpha)} &= 0, \quad f^{(0)}|_{t=0} = f_0^{(0)}(\alpha); \\ \frac{df^{(k)}}{dt} + f^{(k)} \frac{d}{dt} \ln \sqrt{J(t, \alpha)} &= \frac{i}{2m} \frac{\partial^2 f^{(k-1)}(x)}{\partial x^2} \Big|_{x=X(t, \alpha)}, \end{aligned}$$



$$f^{(k)}|_{t=0} = f_0^{(k)}(\alpha), \quad k = \overline{1, \infty}.$$

Проинтегрировав последние уравнения, получим

$$\begin{aligned} f^{(0)}(x, t) &= \frac{f_0^{(0)}(\alpha)}{\sqrt{J(t, \alpha)}} \Big|_{\alpha=A(x,t)}, \\ f^{(k)}(x, t) &= \frac{f_0^{(k)}(\alpha)}{\sqrt{J(t, \alpha)}} \Big|_{\alpha=A(x,t)} + \\ &+ \frac{i}{\sqrt{J(t, \alpha)}} \int_0^t \sqrt{J(\tau, \alpha)} \frac{\partial^2 f^{(k-1)}}{\partial x^2}(X(\tau, \alpha), \tau) d\tau \Big|_{\alpha=A(x,t)}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Функции (2.12) полностью определяют асимптотическое решение задачи Коши (2.1), (2.8) при условии  $J(t, \alpha) \neq 0$ .

◇ При подстановке частичных сумм

$$\Psi^{(N)}(x, t, \hbar) = e^{iS(x,t)/\hbar} \sum_{k=0}^N \hbar^k f^{(k)}(x, t) \quad (2.13)$$

в правой части уравнения (2.1) получим

$$\left\{ -i\hbar\partial_t + \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(x) \right\} \Psi^{(N)} = g^{(N)}(x, t, \hbar), \quad (2.14)$$

где

$$g^{(N)}(x, t, \hbar) = -\hbar^{N+2} e^{iS(x,t)/\hbar} \frac{\partial^2 f^{(N)}(x, t)}{\partial x^2}.$$

◇ Если функции  $f^{(k)}(x, t)$  — финитные, т.е. принадлежат пространству основных функций  $\mathcal{D}$ , то функции  $g^{(N)}(x, t, \hbar)$  также финитные.

Таким образом, нами доказана следующая теорема.

**Теорема 2.1.** Пусть  $J(t, \alpha) \neq 0$  при  $t \in [0, T]$ ,  $\alpha$  принадлежит носителю — функции  $f_0(x)$  и система Гамильтона имеет единственное и гладкое по  $t$  и  $\alpha$  решение. Тогда в полуполосе

$$\Pi_T = \{(x, t) : x = X(t, \alpha), \alpha \in \text{supp } f_0(x), t \in [0, T]\}$$

частичная сумма (2.13) является асимптотическим решением уравнения (2.1) с точностью до  $O(\hbar^{N+2})$  (по правой части) и удовлетворяет начальному условию (2.8) с точностью до  $O(\hbar^{N+1})$  (по норме пространства  $L_2(\mathbb{R}^1)$ ).

◇ Из теоремы 2.1, вообще говоря, не следует, что функция  $\Psi^{(N)}(x, t, \hbar)$  (2.13) является асимптотическим решением задачи Коши (2.1), (2.8). Для того чтобы это доказать, нужно получить асимптотическую оценку нормы разности точного и построенного приближенного решений

$$\|\Psi(x, t, \hbar) - \Psi^{(N)}(x, t, \hbar)\|,$$

где  $\Psi(x, t, \hbar)$  — точное решение задачи Коши (2.1), (2.8).

◇ Здесь и в дальнейшем, если не оговорено противное, под нормой  $\|\cdot\|$  будем понимать норму в пространстве  $L_2(\mathbb{R}^n, d\vec{x})$ :

$$\|\Psi(\vec{x}, t, \hbar)\| = \|\Psi(\vec{x}, t, \hbar)\|_{L_2} = (\langle \Psi(\vec{x}, t) | \Psi(\vec{x}, t) \rangle)^{1/2},$$

а под символом  $\langle | \rangle$  – скалярное произведение в  $L_2$ :

$$\langle \Phi(\vec{x}) | \Psi(\vec{x}) \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \Phi^*(\vec{x}) \Psi(\vec{x}) d\vec{x}.$$

**Теорема 2.2.** Пусть выполнены условия теоремы 2.1. Тогда точное решение задачи Коши (2.1), (2.8) имеет вид

$$\Psi(x, t, \hbar) = \Psi^{(N)}(x, t, \hbar) + w(x, t, \hbar),$$

причем существует такая постоянная  $C$ , что

$$\|w(x, t, \hbar)\|_{L_2} = \hbar^{N+1} C.$$

**Доказательство.** Из (2.1) и (2.14) следует

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial w}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + V(x)w + g^{(N)}(x, t, \hbar), \\ w|_{t=0} &= \hbar^{N+1} \varphi_0^{(N)}(x, \hbar), \end{aligned} \quad (2.15)$$

где

$$\hbar^{N+1} \varphi_0^{(N)}(x, \hbar) = f_0(x, \hbar) e^{iS_0(x)/\hbar} - \Psi^{(N)}(x, 0, \hbar).$$

Для сопряженной функции  $w^*(x, t, \hbar)$  получим

$$-i\hbar \frac{\partial w^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 w^*}{\partial x^2} + V(x)w^* + g^{*(N)}(x, t, \hbar). \quad (2.16)$$

Домножим уравнение (2.15) на  $w^*(x, t, \hbar)$ , а уравнение (2.16) – на  $w(x, t, \hbar)$  и вычтем. Получим выражение

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |w|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( w^* \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - w \frac{\partial^2 w^*}{\partial x^2} \right) - 2i \operatorname{Im} w^* g^{(N)}(x, t, \hbar).$$

Следовательно,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \|w\|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left( w^* \frac{\partial w}{\partial x} - w \frac{\partial w^*}{\partial x} \right) dx - 2i \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} w^* g^{(N)}(x, t, \hbar) dx.$$

Первое слагаемое в правой части равно нулю. В силу неравенства Шварца

$$|\operatorname{Im} \langle u | v \rangle| \leq \|u\|_{L_2} \|v\|_{L_2}$$

получим

$$2\|w\|_{L_2} \frac{\partial}{\partial t} \|w\|_{L_2} \leq \frac{2}{\hbar} \|w\|_{L_2} \|g^{(N)}(x, t, \hbar)\|_{L_2}.$$

Следовательно,

$$\|w(x, t, \hbar)\|_{L_2} - \|w(x, 0, \hbar)\|_{L_2} \leq \frac{1}{\hbar} \int_0^t \|g^{(N)}(x, \tau, \hbar)\|_{L_2} d\tau.$$

Окончательно запишем

$$\|w(x, t, \hbar)\| \leq \hbar^{N+1} \|\varphi_0^{(N)}(x, \hbar)\|_{L_2} + \hbar^{N+1} \int_0^t \left\| \frac{\partial^2 f^{(N)}(x, \tau)}{\partial x^2} e^{iS(x, \tau)/\hbar} \right\|_{L_2} d\tau, \quad (2.17)$$

что и требовалось доказать.

Аналогичное утверждение справедливо и по норме пространства  $\mathcal{C}(\mathbb{R}_x^n)$ .

**Теорема 2.3.** Пусть выполняются условия теоремы 2.2, тогда существует такое  $M = \text{const}$ ,  $M > 0$ , что справедливы оценки

$$\max_{x \in \mathbb{R}} |w(x, t, \hbar)| \leq M \hbar^N, \quad t \in [0, T].$$

**Доказательство** самостоятельно.

**Пример 2.1.** Найти два первых члена асимптотического разложения по  $\hbar \rightarrow 0$  решения  $\Psi(x, t, \hbar)$  задачи

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}, \quad \Psi|_{t=0} = e^{-x^2} e^{ix^2/2\hbar}, \quad x \in \mathbb{R}^1.$$

Указать интервал времени  $t$ , для которого найденное разложение справедливо.

**Решение.** Решение задачи будем искать в виде

$$\Psi(x, t, \hbar) = \frac{1}{\sqrt{|J(x, t)|}} [f^{(0)}(x, t) + i\hbar f^{(1)}(x, t)] e^{iS(x, t)/\hbar},$$

где  $J$  определено формулой (2.12). Главный символ оператора уравнения записывается в виде

$$L(p_t, p, x, t) = p_t + \frac{1}{2m} p^2,$$

а соответствующее уравнение Гамильтона–Якоби есть

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 = 0.$$

Из начальных условий для решения  $\Psi(x, t)$  вытекает, что  $S|_{t=0} = x^2/2$  (см. пример 18.1 [5]). Следовательно,

$$S(x, t) = \frac{mx^2}{2(t+m)}.$$

Для гамильтониана

$$L = p_t + \frac{1}{2m} p^2$$

параметр  $\tau$  на траекториях равен  $t$ . В силу того, что уравнение траекторий в конфигурационном пространстве есть

$$x = X(t, \alpha) = \frac{\alpha}{m} t + \alpha \quad \text{и} \quad \alpha = A(x, t) = \frac{mx}{m+t},$$

справедливо равенство

$$J(t, \alpha) = \frac{\partial X(t, \alpha)}{\partial \alpha} = 1 + \frac{t}{m}, \quad J(x, t) = J(t, \alpha)|_{\alpha=A(x, t)} = \frac{m+t}{m}.$$

Из результатов примера 18.1 [5] с учетом равенств

$$\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial p} = \frac{\partial L}{\partial \varepsilon} = 0$$

найдем

$$f^{(0)}(x, t) = \tilde{f}^{(0)}(\alpha)|_{\alpha=A(x,t)} = \exp \left[ -\frac{m^2 x^2}{(m+t)^2} \right].$$

Функция  $f^{(1)}(x, t)$  определяется соотношением (2.12). При начальном условии  $f_0^{(1)}(\alpha) = 0$  получим

$$\begin{aligned} f_0^{(1)}(x, t) &= \left\{ \int_0^t \frac{i\sqrt{J(\tau, \alpha)}}{\sqrt{J(t, \alpha)}} \frac{\partial^2 f^{(0)}(x, \tau)}{\partial x^2} \Big|_{x=X(\tau, \alpha)} d\tau \right\} \Big|_{\alpha=A(x,t)} = \\ &= i\sqrt{\frac{m}{m+t}} \left\{ \int_0^t \sqrt{\frac{m+\tau}{m}} \left[ \frac{4m^4 x^2}{(m+\tau)^4} - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{2m^2}{(m+\tau)^2} \right] e^{-x^2 m^2 / (m+\tau)^2} \Big|_{x=\alpha(m+\tau)/m} d\tau \right\} \Big|_{\alpha=xm/(m+t)} = \\ &= i \int_0^t \sqrt{\frac{m+\tau}{m+t}} e^{-\alpha^2} \frac{m^2(4\alpha^2 - 2)}{(m+\tau)^2} d\tau \Big|_{\alpha=xm/(m+t)} = \\ &= ie^{-x^2 m^2 / (m+t)^2} \frac{4m^2}{m+t} [\sqrt{m+t} - \sqrt{m}] \frac{2x^2 m^2}{(m+t)^2}. \end{aligned}$$

Окончательно для функции  $\Psi(x, t, \hbar)$  получим

$$\Psi(x, t, \hbar) = \frac{m}{\sqrt{m+t}} \left[ 1 - \frac{i\hbar t}{m+t} \left( 1 - \frac{2x^2 m^2}{(m+t)^2} \right) \right] \exp \left[ -\frac{m^2 x^2}{(m+t)^2} + i \frac{x^2 m}{2\hbar(m+t)} \right].$$

**Пример 2.2.** Найти первый член асимптотического при  $\hbar \rightarrow 0$  разложения решения задачи

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - Ex\Psi, \quad x \in \mathbb{R}^1, \quad \Psi|_{t=0} = \frac{1}{1+x^2}. \quad (2.18)$$

**Решение.** Рассмотрим вспомогательную задачу Коши

$$\Psi|_{t=0} = \frac{1}{1+x^2} e^{ix\xi/\hbar}$$

для уравнения (2.18), из которой при  $\xi = 0$  получим задачу (2.18). В результате для функции  $S(x, t)$  получим задачу Коши, рассмотренную в примере 18.2 [5], решение которой (с заменой  $x_0 \rightarrow \alpha$ ) имеет вид

$$\begin{aligned} S(x, t) &= x(\xi + Et) - \frac{\xi^2 t}{2m} - \frac{E\xi t^2}{2m} - \frac{Et^3}{6m}; \\ \alpha = A(x, t) &= x - \frac{Et^2}{2m} - \frac{\xi}{m} t; \\ J(t, \alpha) &= 1. \end{aligned}$$

Из (2.12) найдем

$$f^{(0)}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{J(t, \alpha)}} f_0^{(0)}(\alpha) \Big|_{\alpha=A(x,t)} = \frac{1}{1+\alpha^2} \Big|_{\alpha=x-Et^2/2m-\xi t} =$$

$$= \frac{1}{1 + (x - Et^2/2m - \xi t)^2}.$$

Следовательно,

$$\Psi^{(0)}(x, t) = \frac{1}{1 + (x - Et^2/2m - \xi t)^2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ x(\xi + Et) - \frac{\xi^2 t}{2m} - \frac{E\xi t^2}{2m} - \frac{Et^3}{6m} \right] \right\}.$$

Отсюда при  $\xi = 0$  получим решение исходной задачи

$$\Psi^{(0)}(x, t) = \frac{1}{1 + (x - Et^2/2m)^2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ xEt - \frac{Et^3}{6m} \right] \right\}.$$

**Пример 2.3.** Найти первый член квазиклассической асимптотики решения задачи Коши

$$\Psi|_{t=0} = e^{ip(x-\xi)/\hbar}, \quad p = \text{const}, \quad \xi = \text{const} \in \mathbb{R}^1$$

для одномерного уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi,$$

описывающего движение квантовой частицы в потенциальном поле  $V(x)$ :

- 1)  $V(x) = 0$ ;
- 2)  $V(x) = -Ex$ ,  $E = \text{const}$ ;
- 3)  $V(x) = \frac{\omega^2 x^2}{2}$ ,  $\omega = \text{const}$ .

**Решение.** Решить самостоятельно и сравнить с ответом:

- 1)  $\Psi_1(x, t, \hbar) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ p(x - \xi) - \frac{p^2}{2} t \right] \right\}$ ;
- 2)  $\Psi_2(x, t, \hbar, p) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ p(x - \xi) - \frac{pEt^2}{2} - \frac{p^2 t}{2} + Ex t - \frac{E^2 t^3}{6} \right] \right\}$ ;
- 3)  $\Psi_3(x, t, \hbar, p) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{px}{\cos \omega t} - \frac{p^2 + \omega^2 x^2}{2\omega} \text{tg } \omega t - p\xi \right] \right\}$ .

Действия  $S(x, t)$  найдены в примерах 18.1 – 18.3 [5].

◇ Функции  $\Psi_2(x, t, \hbar, p)$  являются точными решениями.

**Пример 2.4.** С помощью результатов предыдущего примера найти фундаментальные решения задачи Коши (решения, отвечающие начальному условию  $G|_{t=0} = \delta(x - \xi)$  для уравнения Шрёдингера с потенциалами

- 1)  $V(x) = 0$ ;
- 2)  $V(x) = -Ex$ ;
- 3)  $V(x) = \frac{\omega^2 x^2}{2}$ ,  $x \in \mathbb{R}^1$ .

**Решение.** Воспользовавшись разложением функции  $\delta(x - \xi)$  в  $\hbar^{-1}$ -интеграл Фурье

$$\delta(x - \xi) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip(x-\xi)/\hbar} dp$$

и линейностью уравнения Шрёдингера, для  $G(x, \xi, t, \hbar)$  получим интегральное представление

$$G(x, \xi, t, \hbar) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t, \hbar, p) dp,$$

где  $\Psi(x, t, \hbar, p)$  – решение предыдущей задачи. Отсюда получаем следующие формулы для фундаментальных решений:

- 1)  $G(x, \xi, t, \hbar) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar t}} \exp\left\{\frac{i\hbar(x-\xi)^2}{2t\hbar}\right\};$
- 2)  $G(x, \xi, t, \hbar) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar t}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left[ \frac{(x-\xi)^2}{2t} - \frac{Et(x-\xi)}{2} - \frac{E^2 t^3}{24} + Ext \right]\right\};$
- 3)  $G(x, \xi, t, \hbar) = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi i \hbar \operatorname{tg} \omega t}} \exp\left\{\frac{i\omega}{\hbar} \left[ \frac{x^2 + \xi^2}{2 \operatorname{tg} \omega t} - \frac{x\xi}{\sin \omega t} \right]\right\}.$

При вычислениях мы воспользовались значением гауссова интеграла:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(ap^2+bp+c)} dp = e^{i(c-b^2/4a)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iap'^2} dp' = e^{i(c-b^2/4a)} \sqrt{\frac{\pi}{|a|}} e^{i(\pi/4) \operatorname{sign} a}. \quad (2.19)$$

**Пример 2.5.** Построить первый член квазиклассической асимптотики уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathcal{H}\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, x, \hbar\right)$$

с функцией Гамильтона

$$\mathcal{H}(p, x, \hbar) = \frac{p^2}{2} + \frac{x^2}{2} + \hbar px$$

и начальным условием

$$\Psi(x, 0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{x^2}{2}\right), \quad x \in \mathbb{R}^1.$$

**Решение.** Уравнение Гамильтона–Якоби, отвечающее заданному гамильтониану, имеет вид

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \frac{x^2}{2} = 0.$$

Его решение получено в примере 18.3 [5]. Гамильтоновы траектории задаются уравнениями

$$x = Q(t, \alpha) = -\alpha \sin t - \alpha \cos t, \quad p = P(t, \alpha) = -\alpha \cos t + \alpha \sin t.$$

Следовательно,

$$\alpha = A(x, t) = -\frac{x}{\sin t + \cos t}.$$

Из формул (2.12), (2.13) получим

$$\Psi_2(x, t, \hbar) = \frac{e^{-(i/\hbar)(x^2/2) \operatorname{tg}(t+\pi/4)}}{\sqrt{\sqrt{2} \cos(t + \pi/4)}} e^{iK(x,t)},$$

где

$$K(x, t) = \left[ \int_0^t P(\tau, \alpha) \dot{X}(\tau, \alpha) d\tau \right]_{\alpha=A(x,t)} = \frac{\sin 2t}{2} \frac{x}{\sqrt{2} \cos(t + \pi/4)}.$$



### 3. Задача Коши для свободного одномерного уравнения Шрёдингера

Проиллюстрируем полученные выше результаты на простом примере свободного одномерного уравнения Шрёдингера. Рассмотрим проблемы, возникающие при построении квазиклассических асимптотик в окрестности фокальных точек (точек коллапса волновой функции). Попытаемся выяснить, какие физические эффекты соответствуют этим проблемам.

Сформулируем задачу Коши для одномерного нестационарного уравнения Шрёдингера:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \widehat{\mathcal{H}}\Psi, & \widehat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2, & x \in \mathbb{R}; \\ \Psi|_{t=0} = e^{iS_0(x)/\hbar} \varphi_0(x), & S_0(x) = \frac{x^3}{3}, \end{cases} \quad (3.1)$$

где функция  $\varphi_0(x)$  принадлежит пространству основных функций, причем

$$\Omega_0 = \text{supp}(\varphi_0) = [-1, 0].$$

Волновая функция  $\Psi$  в начальный момент времени представляет собой волновой пакет (рис. 1). При решении этой задачи мы будем руководствоваться схемой, вытекающей из предыдущего рассмотрения:

1. Построить локальное асимптотическое решение уравнения (3.1):
  - а) Найти главный символ гамильтониана из уравнения (3.1) и записать отвечающую ему задачу Коши для уравнения Гамильтона–Якоби.
  - б) Решить уравнение Гамильтона–Якоби для гамильтониана из (3.1) с заменой  $-i\hbar \partial/\partial x \rightarrow p$  и найти эволюцию исходной лагранжевой кривой

$$\Lambda_0^1 = \left\{ (p, x) : p = \frac{\partial S_0(x)}{\partial x}, x \in \Omega_0 \right\}$$

под действием фазового потока, отвечающего классическому гамильтониану  $\mathcal{H}(p, x) = p^2/2$ :

$$\Lambda_t^1 = \hat{g}_\hbar^t \Lambda_0^1, \quad t \in [0, \infty[. \quad (3.2)$$

Здесь  $\hat{g}_\hbar^t$  есть оператор сдвига точек фазового пространства  $\mathbb{R}_{px}^2$  по траекториям гамильтоновой системы

$$\begin{cases} \dot{p} = -\mathcal{H}_x, \\ \dot{x} = \mathcal{H}_p. \end{cases} \quad (3.3)$$

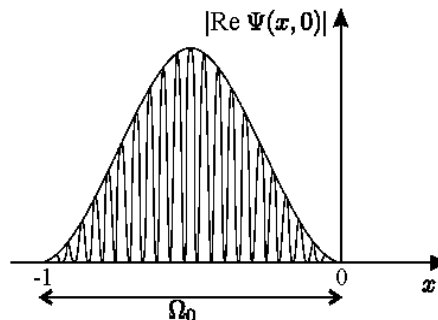


Рис. 1. Модуль реальной части волновой функции  $\Psi_0(x)$  и ее огибающая  $\varphi_0(x)$

- в) Записать приближенное решение уравнения (3.1) в виде ВКБ-асимптотики (3.4) на интервале времени  $0 \leq t < t^* = t_{\max}$ :

$$\Psi^{\text{ВКБ}}(x, t, \hbar) = \frac{e^{iS(\alpha)/\hbar}}{\sqrt{J(t, \alpha)}} \varphi_0(\alpha) \Big|_{\alpha=A(x,t)} = e^{iS(x)/\hbar} \varphi(x, t), \quad (3.4)$$

где  $J(t, \alpha)$  – якобиан перехода из точки  $\alpha$  в точку  $X(t, \alpha)$ . Время  $t_{\max}$  – максимальное время существования квазиклассического ответа в стандартном ВКБ-виде (3.4). Оно зависит от начальных условий и может быть бесконечным. Это время определяется из условия отсутствия на этом интервале фокальных точек.

♦ *Фокальной точкой*, или *точкой коллапса волновой функции*, называется такая точка, в которой обращается в нуль якобиан  $J(t, \alpha)$  при фиксированном  $\alpha \in \Omega_0$ .

2. Исследовать поведение классической системы, отвечающей уравнению (3.1), в окрестности фокальных точек:
  - а) Построить семейство пространственно-временных лучей (ПВЛ) в плоскости  $(x, t)$ . Огибающая этого семейства  $\tilde{\Sigma}_{x,t}$  называется (пространственно-временной) каустикой или зеркалом.
  - б) Дать геометрическую интерпретацию процессов, происходящих в момент  $t^*$  и для  $t > t^*$  в пространстве  $(x, t)$ . В момент времени  $t^*$  траектория в первый раз касается каустики, а в области  $t > t^*$  может происходить пересечение ПВЛ, что с точки зрения движения потока частиц в пространстве  $(x, t)$  означает, что в некоторую точку  $(x, t)$ ,  $t > t^*$ , одновременно приходят несколько частиц.
  - в) Дать геометрическую интерпретацию процессов, происходящих в момент  $t^*$  и для  $t > t^*$  в фазовом пространстве  $(p, x)$ .
3. Построить глобальное асимптотическое решение уравнения (3.1) и исследовать поведение волновой функции в окрестности фокальных точек:
  - а) С помощью оператора Маслова построить решение уравнения (3.1) в целом, т.е. для всех значений  $x \in \mathbb{R}$  и любых  $t \in [0, T]$ , где  $T$ , в частности, может быть больше, чем  $t^*$ .
  - б) Построить асимптотическое решение вблизи фокальной точки и выразить его через специальные функции, которые в рассматриваемой одномерной задаче могут быть либо функциями Эйри, либо функциями Пирси.

Приступим к реализации назначенного плана.

### 3.1. ВКБ-ответ

#### Переход от уравнения Шрёдингера к уравнениям Гамильтона

Уравнение Гамильтона–Якоби, отвечающее главному символу  $\mathcal{H}(p, x)$  гамильтониана  $\hat{\mathcal{H}}$ , имеет вид

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} + \mathcal{H}\left(x, t, \frac{\partial S}{\partial x}\right) = 0; \\ S|_{t=0} = S_0(x), \quad x \in \Omega_0. \end{cases} \quad (3.5)$$

Его характеристики определяются решениями системы уравнений Гамильтона (3.3).

Будем решать уравнения (3.3) и (3.5) при условии

$$\mathcal{H}(x, p) = \frac{p^2}{2m},$$

$$S_0(x) = S(x, 0) = \frac{x^3}{3}, \quad (3.6)$$

$$x \in \Omega_0 = \text{supp}(\varphi_0) = [-1, 0].$$

### Решение уравнения Гамильтона и фазовый поток

Сначала решим задачу Коши для уравнений Гамильтона (3.3). С учетом явного вида гамильтониана (3.6) получим

$$\begin{cases} \dot{p} = 0, & p|_{t=0} = \frac{\partial S_0(\alpha)}{\partial \alpha} = \alpha^2; \\ \dot{x} = p, & x|_{t=0} = \alpha, \end{cases} \rightarrow \begin{cases} p = \alpha^2 = P(t, \alpha), \\ x = \alpha^2 t + x_0 = X(t, \alpha). \end{cases} \quad (3.7)$$

Легко увидеть, что действие фазового потока определяется соотношением

$$\hat{g}_h^t \begin{pmatrix} p_0 \\ x_0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} p_0 \\ x_0 + p_0 t \end{pmatrix}, \quad x_0 = \alpha, \quad p_0 = \alpha^2, \quad (3.8)$$

то есть оператор  $\hat{g}_h^t$  есть оператор сдвига по прямым, параллельным оси  $Ox$  (рис. 2).

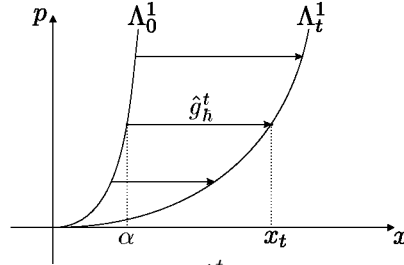


Рис. 2. Действие оператора  $\hat{g}_h^t$  на начальное многообразие

### Классическое действие и якобиан перехода

Найдем классическое действие. Оно определяется как интеграл от лагранжиана по траектории (3.7):

$$\tilde{S}(t, \alpha) = S_0(\alpha) + \int_0^t \left( P(\tau, \alpha) \dot{X}(\tau, \alpha) - \mathcal{H}(P(\tau, \alpha), X(\tau, \alpha)) \right) d\tau. \quad (3.9)$$

С учетом явного вида траектории (3.7) соотношение (3.9) примет вид

$$\tilde{S}(t, \alpha) = \frac{\alpha^3}{3} + \frac{\alpha^4}{2} t. \quad (3.10)$$

Якобиан перехода определяется формулой

$$J_x(t, \alpha) = \frac{DX(t, \alpha)}{D\alpha},$$

из которой, учитывая (3.7), получим

$$J_x(t, \alpha) = 1 + 2\alpha t. \quad (3.11)$$

Соотношение (3.4) определяет ВКБ-ответ при условии

$$J_x(t, \alpha) \neq 0, \quad \alpha \in \Omega_0 = [-1, 0], \quad 0 \leq t < t^*. \quad (3.12)$$

Величина  $t^*$  может быть равна бесконечности, если условие (3.12) выполнено для всех  $t$ . В этом случае существует ВКБ-ответ для любого интервала времени. В противном случае интервал времени, для которого формула (3.4) дает ВКБ-ответ, конечен:  $0 < t < t^*$ , а  $t^*$  есть максимально возможное время, для которого якобиан  $J(t, \alpha)$  отличен от нуля равномерно по  $\alpha \in \Omega$ .

### Значение $t^*$

Определим значение  $t^*$ . Оно зависит от параметра  $\alpha$ , поэтому естественно найти такое минимальное время, для которого якобиан обращается в нуль. В многочастичной интерпретации такой выбор отвечает наиболее быстрым частицам («на гребне волны»). Из явного вида начального импульса можно заметить, что такое время соответствует траектории с параметром  $\alpha = -1$ . Действительно, условие равенства нулю якобиана перехода примет вид

$$J_x(t, \alpha) = 1 + 2\alpha t = 0, \quad \alpha \in \Omega_0 = [-1, 0],$$

откуда

$$t(\alpha) = -\frac{1}{2\alpha}.$$

Следовательно,

$$t^* = \min_{-1 \leq \alpha \leq 0} t(\alpha) = \frac{1}{2}, \quad (3.13)$$

и ему отвечает  $\alpha^* = -1$ .

В момент времени  $t^*$  функция (3.4) принимает бесконечные значения и уже не является решением уравнения (3.1). В этом случае говорят, что происходит коллапс волновой функции или «катастрофа».

Определим точку  $\alpha_0(t)$ , принадлежащую  $\Omega_0$ , для которой якобиан отображения (3.11) обращается в нуль в момент времени  $t \geq t^*$ :

$$\alpha_0(t) = -\frac{1}{2t}, \quad t \geq \frac{1}{2}. \quad (3.14)$$

### Функция $A(x, t)$

Решим уравнение  $x = X(t, \alpha)$  относительно  $\alpha$  при условии (3.12) и найдем функцию  $\alpha = A(x, t)$ . По теореме о существовании неявно заданной функции решение этого уравнения существует и единственно. Из (3.7) запишем

$$x = \alpha^2 t + \alpha. \quad (3.15)$$

Если детерминант  $D(x, t) = 1 + 4xt \geq 0$ , уравнение (3.15) имеет два корня:

$$A^1(x, t) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4xt}}{2t}, \quad A^2(x, t) = \frac{-1 - \sqrt{1 + 4xt}}{2t}. \quad (3.16)$$

Обозначим через  $\tilde{\Sigma}_{x,t}$  множество точек

$$\begin{cases} x = X(t, \alpha), \\ J_x(t, \alpha) = 0, \quad \alpha \in \Omega. \end{cases}$$

Это множество называется пространственно-временной каустикой (ПВК). В нашем примере это множество определяется соотношением

$$\tilde{\Sigma}_{x,t} = \left\{ (x, t) : D = 1 + 4xt = 0 \right\}, \quad t = -\frac{1}{4x}. \quad (3.17)$$

На этом множестве время  $t = t(x)$  касания луча из семейства лучей  $x = X(t, \alpha)$  ПВК в точке  $x$ , очевидно, равно  $t = -1/(4x)$ .

◇ Заметим, что при условии равенства нулю якобиана (3.13) из уравнения (3.15) получим  $t = -1/(4x)$ , что совпадает с множеством (3.17). Поэтому по аналогии с  $\alpha^*(t)$  введем

$$x^*(t) = -\frac{1}{4t}. \quad (3.18)$$

Эти точки отвечают точкам  $\alpha = \alpha^*(t) \in \Omega_0$ , то есть за время  $t \geq t^*$  любая траектория, выпущенная из точки  $\alpha \in \Omega_0$ , достигнет кривой, определяемой уравнением (3.17). Ниже будет дана геометрическая интерпретация этого процесса.

### ВКБ-ответ для $t < t^*$

Поскольку ПВЛ при  $t < t^*$  не пересекаются, то уравнение (3.15) имеет единственное решение. Поэтому из корней (3.16) следует выбрать корень, удовлетворяющий начальному условию  $x|_{t=0} = \alpha$ . Разложив дискриминант в окрестности  $t = 0$ , легко обнаружить, что это корень

$$A(x, t) = A^1(x, t) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4xt}}{2t}. \quad (3.19)$$

Тогда ВКБ-ответ для случая  $t < t^*$  (3.4) примет вид

$$\Psi^{\text{ВКБ}}(x, t, \hbar) = \frac{f_0(\alpha)}{\sqrt{1 + 2x_0 t}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left( \frac{\alpha^3}{3} + \frac{\alpha^4}{2} t \right) \right\} \Big|_{\alpha=A(x,t)}, \quad 0 \leq t < t^* = \frac{1}{2}. \quad (3.20)$$

## 3.2. Геометрическая интерпретация

### Понятие каустики и представления пространственно-временных лучей

◇ Множество точек  $\tilde{\Sigma}_{x,t}$  на плоскости  $(x, t)$ , определяемое соотношением

$$\tilde{\Sigma}_{x,t} = \begin{cases} x = X(t, \alpha), & \alpha \in \Omega_0; \\ t = \tau, & \tau \in (0, T); \\ J_x(t, \alpha) = 0, & \end{cases} \quad (3.21)$$

называется *пространственно-временной каустикой*.

◇ Множество точек, определяемых как

$$\ell_{x,t}(\alpha) = \{ (x, t) : x = X(\tau, \alpha), 0 \leq \tau \leq t \}, \quad (3.22)$$

называется *пространственно-временным лучом* (ПВЛ). Если якобиан  $J_x(\tau, \alpha)$  при  $0 \leq \tau \leq t$  не равен нулю, то луч  $\ell_{x,t}(\alpha)$  ПВЛ называют ПВЛ с неособым концом  $x = X(t, \alpha)$ .

В нашем примере множество  $\tilde{\Sigma}_{x,t}$  (3.21) определяется соотношением (3.17).

Из рис. 3 видно, что кривая  $\tilde{\Sigma}_{x,t}$  является огибающей семейства пространственно-временных лучей  $l_{x,t}(\alpha)$ . На рис. 3 область, соответствующая условию  $D < 0$ , заштрихована. С точки зрения геометрической оптики, ее можно интерпретировать как область тьмы, поскольку световой луч (т.е. траектория) в нее не проникает. Множество точек, удовлетворяющих условию  $D = 0$ , определяет границу этой области – своеобразное «зеркало» в пространстве-времени. Употребление слова «зеркало» оправдано, поскольку происходящие вблизи него эффекты аналогичны тем, которые происходят при отражении световых лучей от обычного зеркала. Например, как у реальной световой волны при отражении, происходит скачок фазы, соответствующий четверти длины волны. Область, удовлетворяющую условию  $D > 0$ , можно интерпретировать как область света. Только в эту область попадают классические частицы из ансамбля частиц с начальной координатой  $X(0) = \alpha \in \Omega$ . На рисунке отмечено время  $t^*$ , которое отвечает моменту касания каустики  $\tilde{\Sigma}_{x,t}$  лучом, выходящим из точки  $\alpha = -1$ . Из рис. 3 видно, что при  $t < t^*$  лучи (траектории) не пересекаются и не касаются каустики  $\tilde{\Sigma}_{x,t}$ . При  $t > t^*$  существуют лучи как касающиеся каустики, так и пересекающиеся друг с другом. Пересечение лучей означает столкновение частиц в конфигурационном пространстве (у двух частиц одинаковые  $x$ ), но не в фазовом (скорости разные). Касанию пространственно-временным лучом каустики  $\tilde{\Sigma}_{x,t}$  отвечает точка  $x^*(t)$ , а сам луч стартует из точки  $\alpha^*(t)$ .

◆ Число, равное числу нулей якобиана, называется *индексом Морса кривой*  $l_{x,t}(\alpha)$  и обозначается  $\mu = \mu(l_{x,t}(\alpha))$ .

Для нашего случая с учетом (3.13) и рис. 3 для индекса Морса лучей  $l_{x,t}(\alpha)$ ,  $\alpha \in \Omega_0$ , получим

$$\mu(l_{\alpha}(t)) = \begin{cases} 0, & t < -\frac{1}{2\alpha} \quad (\text{не коснулся каустики}); \\ 1, & t \geq -\frac{1}{2\alpha}, \quad (\text{коснулся каустики}). \end{cases}$$

Распределение скоростей можно наглядно представить рис. 4. Мы уже отмечали, что для всех  $\alpha \in \Omega_0$  существует момент времени  $t(\alpha) = -1/(2\alpha)$ , для которого якобиан обращается в нуль, то есть пространственно-временной луч  $l_{x,t(\alpha)}(\alpha)$  касается пространственно-временной каустики  $\tilde{\Sigma}_{x,t}$ . Из рис. 3 и рис. 4 видно, что частицы, расположенные ближе к началу координат, имеют меньшую скорость, поэтому траектории части из них коснутся каустики после многократных пересечений с траекториями других, более быстрых частиц.

Рассмотрим еще одно представление. Построим зависимость  $x$  от  $\alpha$ , определяемую формулой (3.15), в разные моменты времени (рис. 5).

При  $t = 0$  начальные условия задачи Коши задают прямую  $x = \alpha$ . При  $0 < t < t^* = 1/2$  кривая в плоскости  $xO\alpha$  есть парабола с минимумом, лежащим левее точки  $\alpha = -1$ . Поэтому все точки  $\alpha \in \Omega_0$  однозначно проектируются на ось  $Ox$ , т.е. между  $x$  и  $\alpha$  существует взаимно однозначное соответствие. При  $t = t^*$  минимум параболы достигается при  $\alpha = -1$ . Это соответствует

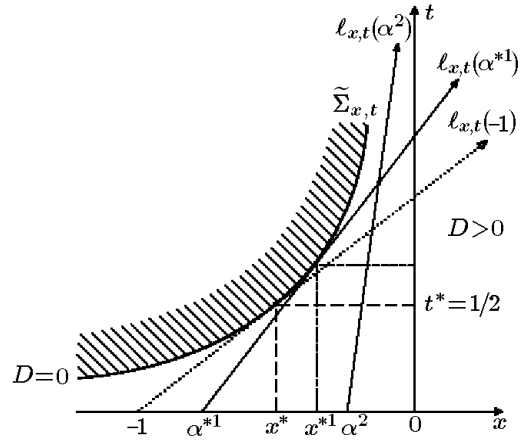


Рис. 3. Распространение пространственно-временных лучей в пространстве-времени, включающем пространственно-временную каустику  $\tilde{\Sigma}_{x,t}$ .



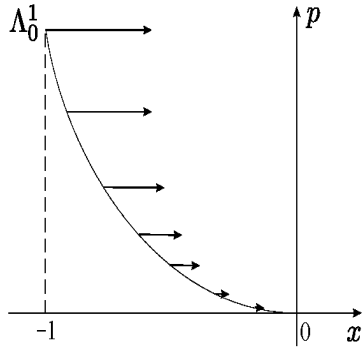
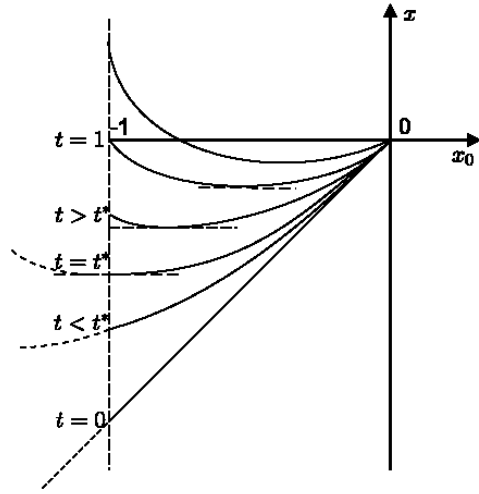


Рис. 4. Распределение скоростей

Рис. 5. Графики  $x = \alpha^2 t + \alpha$  с управляющим параметром  $t$ 

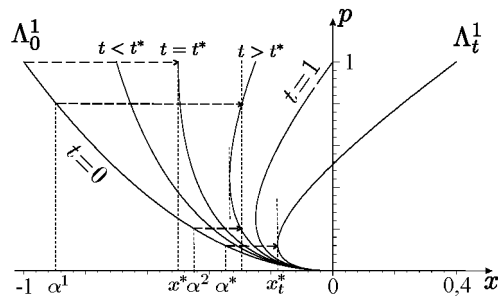
катастрофе или касанию каустики ПВЛ  $\ell_{x,t^*}(-1)$ . Касательная к параболе в этой точке перпендикулярна оси  $Ox$ . При возрастании  $t$  с момента времени  $t^*$  минимум параболы смещается вправо по закону

$$\alpha_{\min}(t) = -\frac{1}{2t}.$$

Нетрудно заметить, что  $\alpha_{\min}(t)$  совпадает с фокальным значением параметра  $\alpha_0(t)$  из (3.14). Как видно из рис. 5, прямые, параллельные оси  $O\alpha$  и лежащие выше точки минимума параболы и ниже точки  $x = 0$ , будут пересекать параболу в двух точках. На рис. 3 этим точкам отвечает пересечение лучей. В области  $x > 0$  при  $t > 1$  парабола однозначно проектируется на ось  $Ox$ . На рис. 3 этой области соответствует область, где нет пересекающихся лучей. В частичной интерпретации это означает, что быстрые частицы уже обогнали медленные, и в дальнейшем пересечение тех и других невозможно.

### Представление в фазовом пространстве

Рассмотрим теперь, что происходит с начальной кривой в фазовом пространстве. Оказывается, что именно такой подход позволяет решить проблемы, связанные с неоднозначностью проецирования  $\Lambda_t^1$  на координатное (конфигурационное) пространство  $\mathbb{R}_x^1$  в момент времени  $t > t^*$ , и построить канонический оператор Маслова. На рис. 6 показано семейство кривых  $\Lambda_t^1$  в разные моменты времени, определяемых уравнениями (3.2), (3.8).

Рис. 6. Семейство кривых  $\Lambda_t^1$  в фазовом пространстве

В начальный момент времени кривая  $\Lambda_0^1$  – ветвь параболы. Поскольку импульс здесь постоянен:  $p = x_0^2$  (3.8), то фазовые траектории параллельны оси  $Ox$ . Следовательно, все точки кривой  $\Lambda_0^1$  под действием оператора сдвига  $\hat{g}_t$  будут смещаться вдоль оси  $Ox$ , но с разными скоростями. В результате в момент времени  $t = t^* = 1/2$  у кривой  $\Lambda_{t^*}^1$  появится вертикальная касательная, уравнение которой:  $x^* = x(t^*) = -1/2$ . Для  $t > t^*$  кривая  $\Lambda_t^1$  будет неоднозначно проецироваться на ось  $Ox$ , но однозначно – на ось  $Op$ . Именно этот факт послужил основой для развития теории канонического оператора. В конфигурационном пространстве неоднозначность проекции при  $t > t^*$  означает, что существуют два луча, стартующих с  $\Lambda_0^1$  и одновременно приходящих в одну и ту же точку пространства (рис. 6).

Обозначим через  $M(x, t)$  количество лучей, стартующих с  $\Lambda_0^1$  в фазовом пространстве и приходящих в точку  $x$  в момент времени  $t$ . Очевидно, что  $M(x, t) = 1$  при  $t < t^*$  и  $M(x, t) = 2$  при  $t > t^*$ .

### Носитель ВКБ-решения

Функция  $\varphi_0(x)$  сосредоточена в области  $\Omega_0$ . Обозначим через  $\Omega_t$  область, полученную из  $\Omega_0$  сдвигом вдоль пространственных лучей  $x = X(t, \alpha)$ . Исследуем подробнее поведение траекторий, выпущенных из области  $\Omega_0$ . Проанализировав соотношение (3.16), мы выяснили, что уравнение  $x = X(t, \alpha)$  имеет два корня. Но для  $t < t^*$ , как мы показали выше, начальным условиям удовлетворяет только один корень (3.19). А для  $t > t^*$  траектории в конфигурационном пространстве пересекаются, т.е. существуют такие точки (см. рис. 3), куда приходят одновременно два луча, выходящих из области  $\Omega_0$ , поэтому следует рассматривать оба корня. Выделим два ПВЛ:  $\ell_{x,t}(\alpha^1)$  и  $\ell_{x,t}(\alpha^2)$ , один из которых коснулся каустики, а другой еще пока нет (рис. 3). Согласно определению (3.2.), их индекс Морса равен

$$\begin{cases} \mu(\ell_{x,t}(\alpha^1)) = 1, & \alpha^1(x, t) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4xt}}{2t}; \\ \mu(\ell_{x,t}(\alpha^2)) = 0, & \alpha^2(x, t) = \frac{-1 - \sqrt{1 + 4xt}}{2t}. \end{cases}$$

Рассмотрим отображение области  $\Omega_0$  под действием преобразования (3.7)  $x = X(t, \alpha)$ ,  $\alpha \in \Omega_0$ . Из рис. 6 для  $t < t^*$  очевидно, что образом области  $\Omega_0$  при этом отображении является  $\Omega_t = [t - 1, 0]$ . Видно также, что для  $t^* < t < 1$  образ  $\Omega_t$  состоит из двух областей: двуслойной  $[x^*(t), t - 1]$  и однослойной  $[t - 1, 0]$ , т.е.  $\Omega_t = [x^*(t), t - 1] \cup [t - 1, 0]$ . Наконец, для  $t > 1$   $\Omega_t = [x^*(t), 0] \cup [0, t - 1]$ . Окончательно имеем

$$\Omega_t = \begin{cases} [t - 1, 0], & t < t^*; \\ [x^*(t), t - 1] \cup [t - 1, 0], & t^* < t < 1; \\ [x^*(t), 0] \cup [0, t - 1], & 1 < t. \end{cases} \quad (3.23)$$

◇ Эффекты, связанные с «отражением» от пространственно-временной каустики  $\tilde{\Sigma}_{x,t}$ : особенность якобиана, время начала катастрофы  $t^*$  – связаны исключительно с начальным состоянием волновой функции (3.1), а в терминах фазового пространства – с начальным распределением импульсов, задаваемых действием  $S_0$ . При интерпретации в терминах частиц отмеченные выше эффекты являются коллективными, поскольку для отдельной траектории они не наблюдаются.

### 3.3. Решение в целом

#### Решение вне фокальных точек

Выше показано, что в фокальных точках якобиан отображения обращается в нуль и формула (3.4) не определяет квазиклассическое решение задачи. Решение задачи Коши (3.1) можно представить в виде

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, y, t) \Psi_0(y) dy, \quad (3.24)$$

где  $G(x, y, t)$  – функция Грина задачи Коши уравнения (3.1). Формулу (3.24) можно записать иначе:

$$\Psi(x, t) = \widehat{U}(t) \Psi_0(x),$$

где  $\widehat{U}(t)$  – оператор эволюции исходного уравнения. В примере 2.4.1 показано, что эта функция имеет вид

$$G(x, y, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar t}} \exp \left[ i \frac{(x-y)^2}{2\hbar t} + \frac{i\pi}{4} \right]. \quad (3.25)$$

Выше мы показали, что область  $\Omega_0$  отображается в область  $\Omega_t$  (3.23), которая для разных  $t$  определяется тремя выражениями. Как следствие, ВКБ-ответ, локализованный в области  $\Omega_t$  (рис. 7), для разных  $t$  также определяется тремя различными выражениями, сшив которые, можно записать (см. формулы (3.10), (3.11)):

$$\Psi^{\text{ВКБ}}(x, t, \hbar) = \begin{cases} e^{iS_1(x,t)/\hbar} \varphi_1(x, t), & t < t^*, \quad x \in [t-1, 0]; \\ \sum_{j=1}^2 c_j e^{iS_j(x,t)/\hbar} \varphi_j(x, t), & t > t^*, \quad x \in [x^*, 0]; \\ c_1 e^{iS_1(x,t)/\hbar} \varphi_1(x, t), & t > 1, \quad x \in [0, t-1], \end{cases} \quad (3.26)$$

где

$$S_j(x, t) = \widetilde{S}(t, \alpha) \Big|_{\alpha=A^j(x,t)};$$

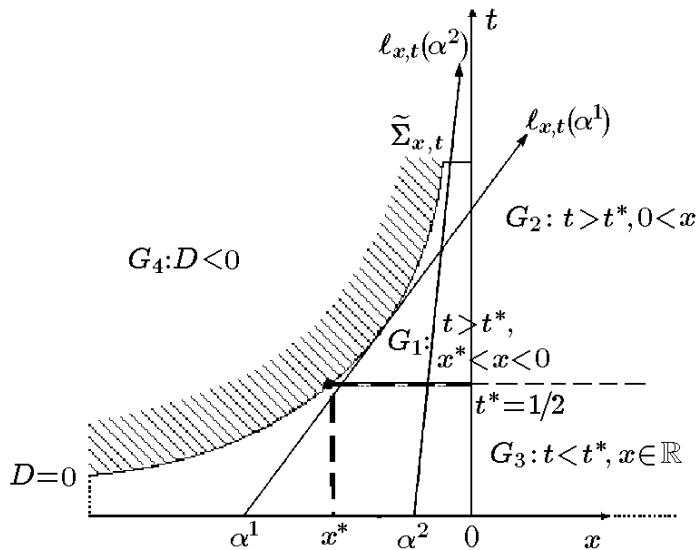


Рис. 7.  $G_1$  отвечает области «двойного слоя»,  $G_2$  – быстрых частиц,  $G_3$  – предфокальная область,  $G_4$  – область «тени».

$$\varphi_j(x, t) = \frac{\varphi_0(\alpha)}{\sqrt{J_x(t, \alpha)}} \Big|_{\alpha=A^j(x, t)}.$$

Для  $t > t^*$  возникают комплексные коэффициенты  $c_1, c_2$ , по модулю равные 1 (см. ниже). Они связаны с «отражением» от пространственно-временной каустики  $\tilde{\Sigma}_{x, t}$ . В области конфигурационного пространства, где траектории частиц пересекаются, волновая функция (3.26) представляет собой суперпозицию двух волновых функций. Первая (индекс 1 согласован с корнем  $A^1$ ) отвечает частицам, «отраженным» пространственно-временной каустикой  $\tilde{\Sigma}_{x, t}$ , а вторая – неотраженным:

$$c_1 = \exp \left[ -i \frac{\pi}{2} \mu(\ell_t(x_0^1)) \right]; \quad c_2 = \exp \left[ -i \frac{\pi}{2} \mu(\ell_t(x_0^2)) \right].$$

Таким образом, квазиклассическая асимптотика определяется геометрическими объектами в фазовом пространстве. В общем случае вместо индекса Морса (3.2.) следует использовать индекс Маслова, который также связан с топологическими свойствами кривой  $\Lambda_t^1$ .

Подставим функцию Грина в явном виде (3.25) в соотношение (3.24):

$$\Psi^{\text{ВКБ}}(x, t, \hbar) = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2\pi\hbar t}} \int_{y \in \Omega_0} e^{i\Phi(x, y, t)/\hbar} \varphi_0(y) dy, \quad (3.27)$$

где функция  $\Phi$  определяется как

$$\Phi(x, y, t) = \frac{(x - y)^2}{2t} + \frac{y^3}{3}. \quad (3.28)$$

◇ Если найти значение функции  $\Phi$  в точке  $x = X(t, \alpha)$ ,  $y = \alpha$ , то оно совпадет с классическим действием  $\tilde{S}(t, \alpha)$  (3.10).

В этом состоит приближение ВКБ: из всех возможных путей выбрать классическую траекторию, которая минимизирует действие. В нашем случае эта траектория определяется выражением (3.7). Возникает естественный вопрос: как связаны точное решение задачи Коши (3.27) с асимптотическим (3.26)? Ниже мы покажем, что они совпадают с точностью  $O(\hbar)$ . Для этого интеграл в (3.27) вычислим с помощью метода стационарной фазы. Этот метод применим вдали от точек, в которых вторая производная функции  $\Phi$  обращается в нуль:

$$\frac{\partial^2 \Phi(x, y, t)}{\partial y^2} = -\frac{1}{t} + 2y = 0$$

(см. условие (3.13)). В результате для главного члена асимптотики получим

$$\Psi^{\text{ВКБ}}(x, t, \hbar) = \sqrt{2\pi\hbar} \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2\pi\hbar t}} \sum_j \frac{e^{i\Phi(x, t, y_j)/\hbar} \varphi_0(y_j)}{\sqrt{|\Phi''_{yy}(x, y_j, t)|}} e^{i\frac{\pi}{4} \text{sign}(\Phi''_{yy}(x, y_j, t))}, \quad (3.29)$$

где  $y_j$  определяется уравнением

$$\Phi'_y(x, y_j, t) = 0$$

при условиях

$$\Phi''_{yy}(x, y_j, t) \neq 0, \quad y_j \in \Omega_0 = \text{supp}(\varphi_0).$$

Нетрудно заметить, что  $y_j$  совпадают с найденными ранее корнями (3.16), а функция (3.29) – с функцией (3.26).

### Функция Эйри

На простом примере стационарного уравнения Шрёдингера для частицы заряда  $e$  в постоянном и однородном электрическом поле с напряженностью  $E$  рассмотрим задачу о построении канонического оператора Маслова. Решение этой задачи позволяет проанализировать поведение решения исходной задачи вблизи фокальной точки. Уравнение Шрёдингера для частицы с энергией  $\varphi$  в поле с потенциалом  $U = -Fx$ , где  $F = eE$ , есть

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + Fx\Psi = \varepsilon\Psi.$$

Не уменьшая общности, так как решение исходной задачи можно восстановить с помощью операций сдвига и преобразования масштаба системы координат, рассмотрим случай, когда энергия системы равна нулю, а  $2m$  и  $F$  равны 1. Тогда получим уравнение

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + x\Psi = 0. \quad (3.30)$$

Введем безразмерную переменную  $\xi$  по правилу

$$\xi = \frac{x}{\hbar^{2/3}}. \quad (3.31)$$

Тогда уравнение (3.30) примет вид

$$\Psi'' - \xi\Psi = 0. \quad (3.32)$$

Решение этого уравнения есть

$$\Psi(\xi) = N \cdot \text{Ai}(\xi), \quad (3.33)$$

где  $N$  – постоянный множитель, а через  $\text{Ai}(x)$  обозначена специальная функция Эйри, определенная интегральным представлением

$$\text{Ai}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos\left(u\xi + \frac{u^3}{3}\right) du \quad (3.34)$$

и нормированная условием

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \text{Ai}(\xi) d\xi = 1.$$

С учетом асимптотических оценок для функции Эйри (см. [10]) получим

$$\Psi(\xi) \underset{\xi \rightarrow \infty}{=} \frac{N}{2|\xi|^{1/4}} e^{-2|\xi|^{3/2}/3}, \quad \Psi(\xi) \underset{\xi \rightarrow -\infty}{=} \frac{N}{|\xi|^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}|\xi|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right). \quad (3.35)$$

На рис. 8 изображены графики функции Эйри и линейного потенциала  $U(x) = x$ . Из рисунка видно, что слева от нуля волновая функция осциллирует, что соответствует суперпозиции налетающей и отраженной волн. В этой области полная энергия частицы больше потенциальной. Справа от начала координат эта функция экспоненциально затухает, поскольку полная энергия частицы меньше потенциальной. Вероятность обнаружить частицу в области  $x > 0$  мала, т.е. частицы не проникают через потенциальный барьер.

Возвратившись к исходным переменным (3.31), получим

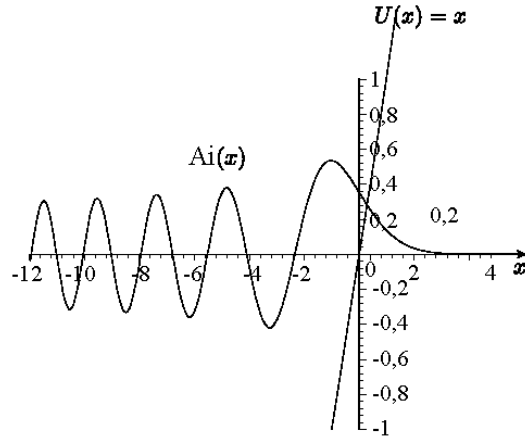


Рис. 8. График функции Эйри (3.34)

$$\Psi(x, \hbar) = N \cdot \text{Ai}\left(\frac{x}{\hbar^{2/3}}\right). \quad (3.36)$$

Константу  $N$  можно найти из условия нормировки

$$N = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar^{2/3}}}. \quad (3.37)$$

Итак, решением уравнения Шрёдингера (3.30), ограниченным на всей оси  $Ox$ , является волновая функция

$$\Psi(x, \hbar) = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar^{2/3}}} \cdot \text{Ai}\left(\frac{x}{\hbar^{2/3}}\right). \quad (3.38)$$

С учетом асимптотических оценок (3.35) для волновой функции (3.38) справедливо

$$\begin{aligned} \Psi(x, \hbar) &= \frac{1}{2|x|^{1/4}\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{2}{3\hbar}|x|^{3/2}\right]; \\ \Psi(x, \hbar) &= \frac{1}{|x|^{1/4}\sqrt{2\pi\hbar}} \sin\left(\frac{2}{3\hbar}|x|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right). \end{aligned} \quad (3.39)$$

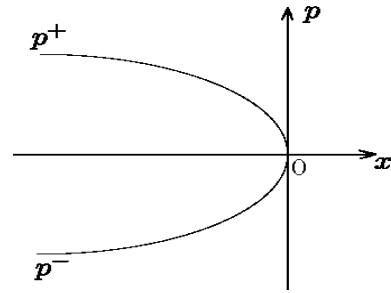
Рассмотрим геометрические объекты в фазовом пространстве, которые связаны с квазиклассической асимптотикой волновой функции. Уравнение  $p^2 + x = E$  на уровне энергии  $E = 0$  имеет два корня (рис. 9):

$$\begin{cases} p^+(x) = \sqrt{-x}, & x \leq 0; \\ p^-(x) = -\sqrt{-x}, & x > 0, \\ p = 0, & x > 0, \end{cases}$$

где  $p^+$  соответствует налетающей частице, а  $p^-$  – отраженной.

Волновую функцию (3.38) можно переписать несколько иначе:

$$\Psi(x, \hbar) = (\widehat{\mathcal{K}}_{\hbar, \Lambda_1}^{0,0} 1)(x) = \text{const} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\Phi(x,p)/\hbar} dp; \quad \Phi(x, p) = px + \frac{p^3}{3},$$

Рис. 9. Фазовая траектория для гамильтониана  $\mathcal{H} = p^2 + x$ ,  $x = 0$ ,  $p^+ = \sqrt{-x}$ ,  $p^- = -\sqrt{-x}$



если использовать оператор Маслова  $\widehat{\mathcal{K}}_{\hbar, \Lambda_1}$ , который будет определен точно позднее. Здесь  $\Lambda_1 = \{(x, p) : \mathcal{H}(x, p) = p^2 + x = E = 0\}$ . Таким образом, оператор Маслова для кривой  $\Lambda_1$ , которая однозначно определяется начальным действием  $S = x^3/3$ , примененный к единице, дает точное решение задачи для частицы в электрическом поле.

Заметим, что в квазиклассическом пределе ( $\hbar \rightarrow 0$ ) в области  $x > 0$  волновая функция обращается в нуль.

◇ Теперь возникает естественный вопрос: зачем мы решали уравнение (3.30), которое совершенно не похоже на уравнение (3.1)? Оказывается, что решение (3.27) уравнения Шрёдингера (3.1) вблизи фокальной точки выражается через функцию Эйри, что связано с выбором начальных условий. В нашем примере начальное действие (распределение импульсов) задавалось функцией  $\alpha^3/3$ , что и определило все рассмотренные выше эффекты (каустика, катастрофы, образование двойного слоя в фазовом пространстве и поведение вблизи фокальной точки). Если бы начальное действие задавалось функцией  $\alpha^4$ , вместо функции Эйри использовалась бы функция Пирси.

### Решение вблизи фокальной точки

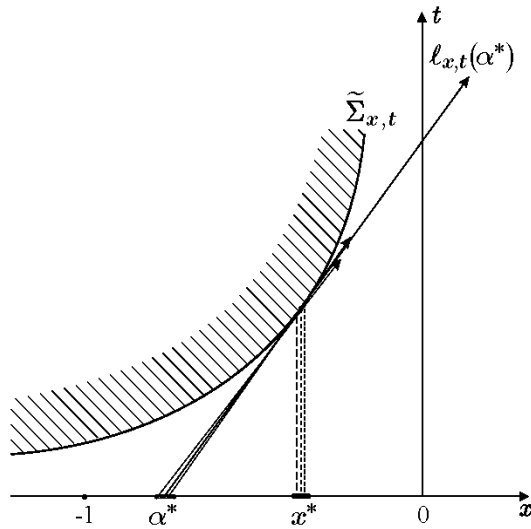


Рис. 10.

Исследуем поведение решения вблизи фокальной точки  $x^*(t)$ . Функция Грина (3.24) позволила найти решение задачи Коши с произвольными начальными условиями. В результате задача (3.1) свелась к вычислению интеграла (3.27), зависящего от параметра  $x$ . Вычислим этот интеграл в окрестности точки  $x^*(t)$ , воспользовавшись представлением пространственно-временных лучей, что естественно для построения ВКБ-асимптотик. Заметим, что окрестности точки  $x^*(t)$  отвечает окрестность точки  $\alpha^*(t)$ , принадлежащая области  $\Omega_0$  (рис. 10).

В интеграле (3.27) сделаем замену переменных

$$\begin{aligned} \alpha &= \alpha^* + \xi, & \alpha^* &= -\frac{1}{2t}, \\ x &= x^* + \eta, & x^* &= -\frac{1}{4t}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

В результате функция (3.28) примет вид

$$\Phi(x^* + \eta, \alpha^* + \xi, t) = -\frac{\eta\xi}{t} + \frac{\xi^3}{3} + \lambda(\eta, t), \quad (3.41)$$

где

$$\lambda(\eta, t) = \frac{1}{96} \frac{48\eta^2 t^2 + 24\eta t - 1}{t^3}.$$

Сделав еще одну замену  $\xi = z\hbar^{1/3}$ , запишем (3.27) в виде

$$\Psi_{\text{фок}}^{\text{ВКБ}}(x(\eta, t), t, \hbar) = \frac{e^{i\lambda(x, t)/\hbar}}{\sqrt{2\pi i \hbar t}} \int_{-\infty}^{\infty} \hbar^{1/3} e^{i(\zeta z + z^3/3)} \varphi_0(z\hbar^{1/3} + \alpha^*) dz; \quad (3.42)$$

$$\zeta = -\frac{\eta\hbar^{-2/3}}{t} = \frac{x^* - x}{t\hbar^{2/3}}.$$

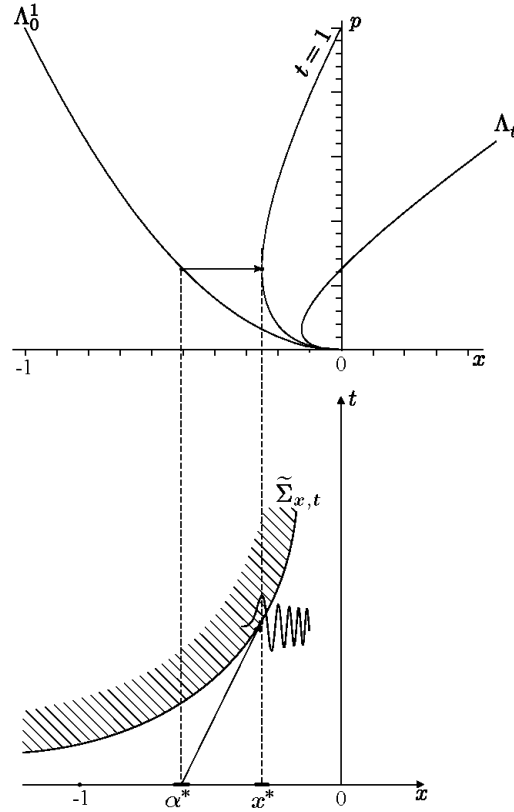


Рис. 11. «Отражение» волнового пакета (частиц) от пространственно-временной каустики

Разложим функцию  $\varphi_0$  в ряд Тейлора по  $\hbar^{1/3}$ :

$$\varphi_0(z\hbar^{1/3} + \alpha^*) = \varphi_0(\alpha^*) + O(z\hbar^{1/3}).$$

Тогда с точностью  $O(\hbar^{1/3})$  выражение (3.42) примет вид

$$\Psi_{\text{фок}}^{\text{ВКБ}}(x(\eta, t), t, \hbar) = \frac{e^{i\lambda(x,t)/\hbar}}{\sqrt{2\pi i \hbar t}} \hbar^{1/3} \varphi_0(\alpha^*) \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\zeta z + z^3/3)} dz.$$

Последнее выражение с помощью функции Эйри (3.34) можно записать как

$$\Psi_{\text{фок}}^{\text{ВКБ}}(x, t, \hbar) = \frac{1}{\hbar^{1/6}} \sqrt{\frac{2}{it}} e^{i\lambda(x,t)/\hbar} \varphi_0(\alpha^*(t)) \text{Ai}\left(\frac{x^*(t) - x}{\hbar^{2/3} t}\right). \quad (3.43)$$

Это выражение описывает поведение решения вблизи фокальной точки.

Возрастание амплитуды плотности вероятности вблизи фокальной точки можно объяснить тем, что фазовая кривая в фокальной точке имеет вертикальную касательную (см. рис. 6). С этой точки зрения, в окрестности этой точки вероятность обнаружить несколько частиц, имеющих близкие импульсы, велика. Этим фокальная точка существенно отличается от области, где одновременно проходят две частицы с разными импульсами. На рис. 11 схематично показано поведение волнового пакета вблизи фокальной точки. Каустика  $\tilde{\Sigma}_{x,t}$  играет роль потенциального барьера для частиц, как и потенциал  $U(x) = x$ .

### Ответ ВКБ в целом

Выше мы рассмотрели поведение волновой функции вдали от фокальных точек, поскольку выражение (3.26) справедливо, лишь когда якобиан отображения отличен от нуля. Напротив, выражение (3.43) описывает решение вблизи

фокальной точки. С точки зрения квантовой механики, естественно считать эти волновые функции. Ниже мы сделаем это с помощью оператора Маслова, а пока выпишем ВКБ-ответы для разных областей:

$$\Psi^{\text{ВКБ}}(x, t, \hbar) = \begin{cases} O(\hbar^\infty), & (x, t) \in G_4; \\ O(\hbar^\infty), & x < -1; \\ e^{iS_1(x,t)/\hbar} \varphi_1(x, t), & (x, t) \in G_3; \\ e^{-i\pi/2} e^{iS_1(x,t)/\hbar} \varphi_1(x, t), & (x, t) \in G_2; \\ e^{-i\pi/2} e^{iS_1(x,t)/\hbar} \varphi_1(x, t) + e^{iS_2(x,t)/\hbar} \varphi_2(x, t), & (x, t) \in G_1, x > x^*(t) + \varepsilon; \\ \frac{1}{\hbar^{1/6}} \sqrt{\frac{2}{it}} e^{i\lambda(x,t)/\hbar} \varphi_0(\alpha^*) \text{Ai}\left(\frac{x^*(t) - x}{\hbar^{2/3}t}\right), & x \in [x^*(t), x^*(t) + \varepsilon], \end{cases} \quad (3.44)$$

где

$$\begin{aligned} S_j(x, t) &= \tilde{S}(\alpha_0, t) \Big|_{\alpha=A^j(x,t)}, \\ \varphi_j(x, t) &= \frac{\varphi_0(\alpha)}{\sqrt{J_x(\alpha, t)}} \Big|_{\alpha=A^j(x,t)}, \\ A^{1,2}(x, t) &= \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 4xt}}{2t}, \\ \tilde{S}(\alpha, t) &= \frac{\alpha^3}{3} + \frac{\alpha^4}{2}t, \\ J_x(t, \alpha) &= 1 + 2\alpha t. \end{aligned}$$

#### 4. Квазиклассическая асимптотика для стационарного одномерного уравнения Шрёдингера

Рассмотрим уравнение

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x) \right] \Psi = E\Psi. \quad (4.1)$$

Решение уравнения будем искать в виде

$$\Psi(x) = e^{iS(x)/\hbar} f(x, \hbar), \quad (4.2)$$

где предэкспонента регулярно зависит от  $\hbar$ :

$$f(x, \hbar) = f^{(0)}(x) + \hbar f^{(1)}(x) + \dots$$

Подставим (4.2) в (4.1) и приравняем коэффициенты при одинаковых степенях  $\hbar$ :

$$\hbar^0 : \quad \left[ \frac{(S')^2}{2m} + V(x) - E \right] f^{(0)} = 0, \quad (4.3)$$

$$\hbar^1 : \quad \left[ \frac{(S')^2}{2m} + V(x) - E \right] f^{(1)} - i \left[ \frac{S'}{m} (f^{(0)})' + \frac{S''}{2m} f^{(0)} \right] = 0, \quad (4.4)$$

◇ Отметим, что если решение уравнения Гамильтона–Якоби (2.6) искать методом разделения переменных

$$S(x, t) = Et + S(x),$$

то для функции  $S(x)$  получим уравнение (4.3).

◇ Уравнение (4.3) имеет гладкое решение, если  $S'$  можно выразить через гладкую функцию от  $x$ , т.е. если уравнение

$$\frac{p^2}{2m} + V(x) = E$$

можно разрешить относительно  $p = \mathcal{P}(x)$ .

Рассмотрим случай, когда (см. рис. 12)

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = 0, \quad E > \max_{x \in \mathbb{R}} V(x).$$

В этом случае кривые  $\Lambda_1$  и  $\Lambda_2$  определяются соотношениями

$$\begin{aligned} \Lambda_1 : \quad \mathcal{P}_1(x) &= \sqrt{2m[E - V(x)]}, \\ \Lambda_2 : \quad \mathcal{P}_2(x) &= -\sqrt{2m[E - V(x)]}, \end{aligned}$$

и однозначно проецируются на ось  $Ox$ .

Уравнение (4.3) имеет два решения:

$$S_1(x) = \int_{x_1}^x \mathcal{P}_1(x) dx, \quad S_2(x) = \int_{x_2}^x \mathcal{P}_2(x) dx.$$

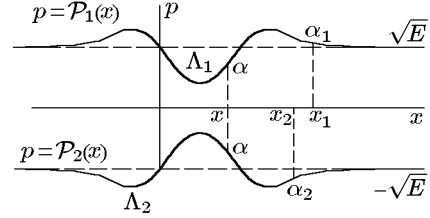


Рис. 12.

Здесь  $x_1$  и  $x_2$  — произвольные постоянные. Определим функцию  $f^{(0)}(x)$ . Из уравнения

$$\frac{1}{m}(S')(f^{(0)})' + \frac{S''}{2m}f^{(0)} = 0$$

следует, что

$$f^{(0)}(x) = \frac{N}{\sqrt{|S'(x)|}}, \quad N = \text{const}. \quad (4.5)$$

Аналогично строятся все последующие приближения.

Рассмотрим систему Гамильтона

$$\dot{x} = \frac{p}{m}; \quad \dot{p} = -V_x(x). \quad (4.6)$$

Видно, что кривые  $\Lambda_1, \Lambda_2$  описываются этой системой. Так как кривые однозначно проектируются на ось  $Ox$ , можно ввести индуцированную меру  $dx$  по правилу

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}, \quad \frac{dt}{dx} = \frac{m}{p}.$$

◇ Таким образом,

$$f^{(0)}(x) = N \sqrt{\left| \frac{dt}{dx} \right|}.$$

При подстановке ее в (4.1) в правой части получим невязку

$$g(x, \hbar) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 f^{(0)}(x)}{\partial x^2}.$$

Следовательно, доказана теорема:

**Теорема 4.1.** Пусть  $V(x)$  — гладкая функция, убывающая на бесконечности:

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = 0.$$

Тогда существуют две линейно независимые функции

$$\begin{aligned} \Psi_1(x, \hbar) &= e^{iS_1(x)/\hbar} f_1^{(0)}(x), \\ \Psi_2(x, \hbar) &= e^{iS_2(x)/\hbar} f_2^{(0)}(x), \end{aligned} \quad (4.7)$$

удовлетворяющие уравнению (4.1) с точностью до слагаемых, пропорциональных  $\hbar^2$ . Здесь  $f_{1,2}^{(0)}$  определяются соотношением (4.5), т.е.  $f_1^{(0)} = f_2^{(0)} = N/[E - V(x)]^{1/4}$ .

◇ Из доказанной теоремы, вообще говоря, не следует, что модуль разности между точным и приближенным решениями

$$\|\Psi_{\text{ex}} - \Psi_{1,2}\| = O(\hbar), \quad (4.8)$$

т.е. имеет порядок  $O(\hbar)$ . Оценку (4.8) можно доказать, используя интегральные уравнения.

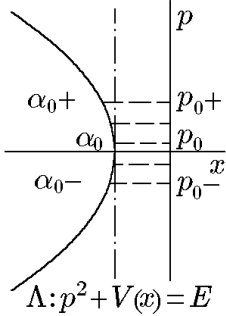


Рис. 13.

◇ Неравенство  $V(x) < E$  справедливо не для всех значений переменной  $x$ . Следовательно, уравнения (4.6) определяют асимптотику решения локально — лишь в областях  $x$ , где выполняется  $V(x) < E$ .

Рассмотрим случай, когда кривая  $\Lambda$  имеет касательную, параллельную оси  $Op$  (см. рис. 13).

Тогда не существует окрестности точки  $x_0$ , в которой кривая  $\Lambda$  проектировалась бы однозначно на ось  $Ox$ . Следовательно, построенные конструкции непригодны для этой области.

Заметим, что в окрестности точки  $x_0$  в качестве локальной координаты на  $\Lambda$  можно выбрать координату  $p$ . Поэтому перейдем в уравнении Шрёдингера в  $p$ -представление. Используем  $\hbar$ -преобразование Фурье

$$F_{x \rightarrow p} \Psi(x) \equiv \tilde{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x) dx; \quad (4.9)$$

$$F_{p \rightarrow x}^{-1} \tilde{\Psi}(p) \equiv \Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{-2\pi\hbar i}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \tilde{\Psi}(p) dp.$$

$\hbar$ -Преобразование Фурье обладает всеми свойствами преобразований Фурье, в частности

- 1)  $F_{x \rightarrow p} \left[ \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^k \Psi(x) \right] = p^k \tilde{\Psi}(p),$
- 2)  $F_{x \rightarrow p} [x^k \Psi(x)] = \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right)^k \tilde{\Psi}(p).$

Предположим, что

$$V(x) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k x^k,$$

$$F_{x \rightarrow p} [V(x) \Psi(x)] = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \left( i\hbar \frac{d}{dp} \right)^k \tilde{\Psi}(p).$$

Уравнение Шрёдингера в  $p$ -представлении примет вид

$$\left[ \frac{p^2}{2m} + V \left( i\hbar \frac{d}{dp} \right) \right] \tilde{\Psi} = E \tilde{\Psi}. \quad (4.10)$$

Решение этого уравнения будем искать в виде

$$\tilde{\Psi}(p) = e^{i\Phi(p)/\hbar} \chi(p, \hbar), \quad (4.11)$$

где

$$\chi(p, \hbar) = \chi^{(0)}(p) + \hbar\chi^{(1)}(p) + \dots$$

Подставим (4.11) в (4.10) и приравняем коэффициенты при одинаковых степенях  $\hbar$ :

$$\hbar^0 : \frac{p^2}{2m} + V(-\Phi'(p)) = E, \quad (4.12)$$

$$\hbar^1 : \frac{\partial V(-\Phi'(p))}{\partial x} (\chi^{(0)})' - \frac{1}{2} V''(-\Phi'(p)) \Phi''(p) \chi^{(0)} = 0, \quad (4.13)$$

.....

Первое уравнение в (4.13) разрешимо относительно  $x = X(p)$ , где  $x \equiv -\Phi'(p)$ :

$$\frac{p^2}{2m} + V(x) = E,$$

$$S(p) = - \int_{p_0}^p X(p) dp = p_0 X(p_0) + \int_{p_0}^p p dX(p) - pX(p).$$

Следовательно,

$$\chi^{(0)}(p) = C_1 / \sqrt{\left| \frac{\partial V(-\Phi')}{\partial x} \right|} = C_1 \sqrt{\left| \frac{dt}{dp} \right|}.$$

◇ Итак, мы построили асимптотику функции  $\tilde{\Psi}(p)$ . Чтобы найти решение уравнения Шрёдингера (4.1), необходимо сделать обратное преобразование Фурье

$$\Psi_3(x) = \frac{1}{\sqrt{-2\pi\hbar i}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{(ipx/\hbar) + (i\Phi(p)/\hbar)} \chi^{(0)}(p) dp. \quad (4.14)$$

◇ Когда фазовая кривая однозначно проектируется как на ось  $Ox$ , так и на ось  $Op$  (см. рис. 14), функции  $\Psi_1(x, \hbar)$  (4.7) и  $\Psi_3(x, \hbar)$  (4.11) являются асимптотическими с точностью до  $O(\hbar^2)$  решениями уравнения (4.1). Выясним, как эти функции связаны между собой. Для этого нужно вычислить интеграл по  $p$  в (4.14). Вычисление проведем методом стационарной фазы. Критические точки определяются из условия  $x + \Phi'(p) = 0$ .

В предположении, что  $\Phi''(p) \neq 0$ , найдем гладкий, зависящий от  $x$  как параметра, корень этого уравнения  $p = \mathcal{P}(x)$ , который определяет невырожденную стационарную точку интеграла (4.14). Тогда

$$\Psi_3(x) = \frac{1}{\sqrt{2\mathcal{P}(x)}} \exp \left\{ \frac{iS(x)}{\hbar} + \frac{i\pi}{4} \text{sign } \Phi''_{pp} \right\} + O(\hbar).$$

Таким образом, функция  $\Psi_3(x)$  отличается от функции  $\Psi_1(x)$  множителем

$$\exp \left\{ \frac{i\pi}{4} \text{sign } \Phi''_{pp} \right\}.$$

Поскольку  $-\Phi'(p) = x$ , этот множитель можно представить в виде

$$\exp \left\{ -\frac{i\pi}{4} \text{sign} \left( \frac{\partial x}{\partial p} \right) \right\}.$$

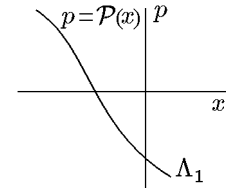


Рис. 14.

**Пример 4.1.** Пусть  $y(x, \hbar)$  – ограниченное по  $x$  и  $\hbar$  при  $\hbar \rightarrow 0$  в области  $|x| > \varepsilon$  решение уравнения Эйри

$$\hbar^2 y''(x) + xy(x) = 0, \quad -\infty < x < \infty.$$

Найти первый член асимптотического разложения  $y(x, \hbar)$  при  $\hbar \rightarrow 0$ . Доказать, что при  $x < 0$  справедлива оценка  $y(x, \hbar) = O(\hbar^\infty)$ .

**Решение.** Для нахождения ограниченного по  $x$  и  $\hbar$  при  $\hbar \rightarrow 0$  решения уравнения Эйри применим  $\hbar^{-1}$ -преобразование Фурье

$$y(x, \hbar) = \frac{1}{\sqrt{-2\pi i \hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \tilde{y}(p, \hbar) dp. \quad (4.15)$$

Для функции  $\tilde{y}(p, \hbar)$  получим обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка

$$-p^2 \tilde{y}(p, \hbar) - i\hbar \frac{d\tilde{y}(p, \hbar)}{dp} = 0.$$

Решив его, найдем функцию  $\tilde{y}(p, \hbar)$  в явном виде

$$\tilde{y}(p, \hbar) = A(\hbar) e^{ip^3/3\hbar}.$$

Подставив последнее выражение в (4.15), получим равенство

$$y(x, \hbar) = \frac{A(\hbar)}{\sqrt{-2\pi i \hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \left( px - \frac{p^3}{3} \right) \right] dp.$$

Производная  $F'_p(x, p)$  функции  $F(x, p) = px - p^3/3$  обращается в нуль в точках  $p_1 = \sqrt{x}$  и  $p_2 = \sqrt{-x}$ . Воспользовавшись разложением единицы:

$$1 = \sum_{j=1}^4 e_j(p),$$

где

$$e_1(p_1) = e_2(p_2) = 1, \quad e_3(p) = e_4(p) = 0$$

при  $|p| < 2\sqrt{x}$ , методом стационарной фазы (см. [2]) получим

$$\begin{aligned} y(x, \hbar) &= A(\hbar) \left\{ \frac{1}{\sqrt{x}} \left[ \exp \left( -\frac{2i}{3\hbar} x^{3/2} + \frac{i\pi}{4} \right) + \exp \left( \frac{2i}{3\hbar} x^{3/2} - \frac{i\pi}{4} \right) \right] + O(\hbar) \right\} = \\ &= A(\hbar) \left[ \frac{2}{\sqrt{x}} \cos \left( \frac{2}{3\hbar} x^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right) + O(\hbar) \right], \end{aligned}$$

где  $A(\hbar)$  – произвольная, ограниченная при  $\hbar \rightarrow 0$  функция.

Доказательство второго утверждения проводится методом стационарной фазы (см., например, [2]).

## 5. Сшивание локальных асимптотик. Квантование замкнутых кривых

Сопоставим в плоскости  $\mathbb{R}_{xp}^2$  уравнению

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x) \right\} \Psi = E\Psi \quad (5.1)$$

кривую  $\Lambda_1$  (линию уровня энергии  $E$  классического гамильтониана), определяемую уравнением

$$\frac{p^2}{2m} + V(x) = E. \quad (5.2)$$

Пусть часть  $\Omega_1$  этой кривой однозначно проектируется на ось  $Ox$  так, что на этой проекции уравнение (5.2) однозначно и гладким образом разрешимо относительно  $p$ . Тогда соответствующая асимптотика имеет вид

$$\Psi_1(x) = \frac{C_1}{\sqrt{dx/dt}} e^{iS(x)/\hbar}, \quad S(x) = \int_{x_0}^x \mathcal{P}(x) dx,$$

где  $x$  – проекции дуги  $\Omega_1$  на  $\mathbb{R}_x^1$ . Пусть теперь  $\Omega_2$  – часть кривой, однозначно проектирующаяся на ось  $Op$  так, что на этой проекции уравнение (5.2) однозначно и гладким образом разрешимо относительно  $x = \mathcal{X}(p)$ . С этой дугой связано асимптотическое решение вида

$$\Psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar + i\Phi(p)/\hbar} \frac{1}{\sqrt{dp/dt}} dp.$$

Пусть, наконец,  $(p, x) \in \Omega_1 \cup \Omega_2$ . Тогда в точке  $x$ , принадлежащей проекции  $\Omega_1 \cup \Omega_2$  на ось  $Ox$ , мы имеем два асимптотических решения  $\Psi_1(x)$  и  $\Psi_2(x)$  (см. рис. 15), для которых справедливо равенство

$$\Psi_2(x) = e^{-i\pi \operatorname{sign} \Phi''(p)/4} \Psi_1(x) + O(\hbar).$$

Для удобства обозначим

$$\operatorname{sign} \Phi''(p) = \operatorname{sign} \frac{\partial x}{\partial p} = -2 \operatorname{inerdex} \frac{\partial x}{\partial p} + 1,$$

$$\operatorname{inerdex} g = \begin{cases} 0, & g > 0; \\ 1, & g < 0. \end{cases}$$

Следовательно, функции  $\Psi_2(x)$ ,  $\Psi_1(x)$  отличаются на множитель

$$C = \exp \left[ \frac{i\pi}{2} \operatorname{inerdex} \frac{\partial x}{\partial p} \right] = \exp \left[ \frac{i\pi}{2} \sigma(\Omega_1, \Omega_2) \right]. \quad (5.3)$$

◆ Число  $\sigma(\Omega_1, \Omega_2)$  (5.3) называется *индексом пересечения карт*  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$ .

Разобьем кривую  $\Lambda$  на области  $\Omega_j$  – карты, каждая из которых однозначно проектируется либо на ось  $Ox$ , либо на ось  $Op$ . Предположим, что  $\Lambda$  можно покрыть конечным количеством карт  $\Omega_j$ ,  $j = 1, m$ . Для определенности положим,

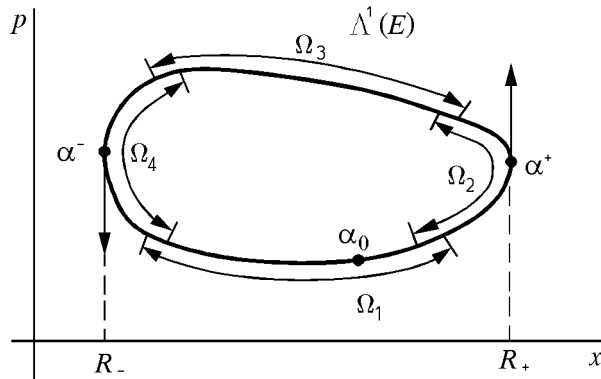


Рис. 15.



что если кривая замкнута, то  $\Omega_1 = \Omega_m$  (первая и последняя карты совпадают). Если же кривая  $\Lambda$  не замкнута, то касательные к ней в граничных точках не параллельны оси  $Op$  либо уходят на бесконечность. В последнем случае  $\Lambda$  не имеет вертикальных асимптот. Предположим также, что кривая  $\Lambda$  не имеет самопересечений.

◆ Карта  $\Omega_k$  называется *неособой*, если она однозначно проектируется на ось  $Ox$ , и *особой* в противном случае.

Все перечисленные выше предположения относятся к неособой карте. Каждой неособой карте сопоставим функцию

$$\Psi_j(x) = C_j \frac{1}{\sqrt{dx/dt}} e^{iS(x)/\hbar} e_j(x), \quad (5.4)$$

любой особой карте — функцию

$$\Psi_k(x) = \frac{C_k}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar + i\Phi(p)/\hbar} \frac{1}{\sqrt{dp/dt}} e_k(p) dp, \quad (5.5)$$

где  $e_j(\alpha)$  — разбиение единицы, отвечающее карте  $\Omega_j$ , т.е.  $e_j(\alpha)$  — бесконечно дифференцируемые функции, удовлетворяющие условию  $\text{supp } e_j(\alpha) = \Omega_j$  и для всех  $\alpha \in \Lambda$

$$\sum_{j=1}^m e_j(\alpha) = 1.$$

Пусть в уравнении Шрёдингера (5.1) потенциал  $V(x)$  — полином степени  $n$ , причем  $V(x) \rightarrow +\infty$  при  $|x| \rightarrow \infty$ . Следовательно, кривая  $\Lambda(E)$  в фазовом пространстве  $\mathbb{R}_{px}^2$ , определяемая уравнением

$$\frac{p^2}{2m} + V(x) = E, \quad E > 0,$$

замкнута (см. рис. 15). Может оказаться, что уравнение на  $\Lambda$  задает неоднозначную кривую. Тогда будем рассматривать одну из них.

Построим асимптотическое решение (5.1) в виде

$$\Psi(x) = \sum_{j=1}^m \Psi_j(x) \quad (5.6)$$

Функции  $\Psi_j$  определяются соотношением (5.4), если карта неособая, и (5.5), если карта особая. При этом  $C_k$  выбираются из условий гладкости сшивания на пересечениях двух карт

$$C_k = C_1 \exp \left[ \frac{i\pi}{2} \sigma(\Omega_1, \dots, \Omega_k) \right].$$

◆ Число

$$\sigma(\Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_k) = \sigma(\Omega_1, \Omega_2) + \sigma(\Omega_2, \Omega_3) + \dots + \sigma(\Omega_{k-1}, \Omega_k). \quad (5.7)$$

называется *индексом цепочки карт*  $\Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_k$ . Индекс цепочки карт покрывающих всю замкнутую кривую  $\Lambda$  называется *индексом кривой*  $\Lambda$  и обозначается  $\sigma(\Lambda)$ .

◆ Функция (5.6), вообще говоря, не является однозначной и зависит от способа обхода кривой  $\Lambda(E)$ . Чтобы соотношение (5.6) определяло однозначную функцию  $\Psi$ , необходимо выполнение условия

$$\exp \left[ \frac{i}{\hbar} \oint_{\Lambda(E)} p dx - \frac{i\pi}{2} \sigma(\Lambda) \right] = 1,$$

или

$$\oint_{\Lambda(E)} p dx = 2\pi k \hbar + \frac{\pi}{2} \hbar \sigma(\Lambda).$$

Поскольку для замкнутой кривой  $\sigma(\Lambda) = 2$ , получим уравнение

$$\oint_{\Lambda(E)} p dx = 2\pi \hbar \left( k + \frac{1}{2} \right) \quad (5.8)$$

относительно спектрального параметра  $E = E_k(\hbar)$ ,  $k = \overline{0, \infty}$ . Это уравнение в физической литературе известно как условие квантования Бора–Зоммерфельда. Чтобы функция (5.6) была однозначно определена, необходимо выполнение условия (5.8), которое справедливо лишь для дискретных значений энергии.

**Теорема 5.1.** Пусть условие (5.8) выполнено. Тогда функция (5.6)  $\Psi(x) = \Psi_{E_k}(x)$ ,  $k = \overline{0, \infty}$ , удовлетворяет уравнению

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x) - E_k \right] \Psi = f_k(x, \hbar),$$

где

$$\|f_k(x, \hbar)\|_{L_2} \leq \hbar^2 M, \quad M = \text{const},$$

т.е. (5.6) является формальным асимптотическим с точностью до  $O(\hbar^2)$  решением задачи (5.1).

Без доказательства.

**Следствие.** Полученные из условия квантования (5.8) числа  $E = E_k(\hbar)$ ,  $k = \overline{0, \infty}$ , аппроксимируют некоторое точное собственное значение квантового гамильтониана

$$\widehat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x),$$

т.е. для любого  $k$  существует точное собственное значение  $E_k^{\text{ex}}$  такое, что

$$|E_k - E_k^{\text{ex}}| < \hbar^2 N, \quad N = \text{const},$$

где  $N$  не зависит от  $\hbar$ .

**Доказательство.** Оператор

$$\widehat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x) \quad (5.9)$$

является самосопряженным в  $L_2$ . Из функционального анализа известно, что для любого  $\lambda$  справедливо

$$\|(\widehat{\mathcal{H}} - \lambda)^{-1}\|_{L_2} \leq \frac{1}{d(\lambda)}, \quad (5.10)$$

где  $d(\lambda)$  — расстояние от  $\lambda$  до ближайшего собственного значения оператора  $\widehat{\mathcal{H}}$ . Пусть  $\lambda = E_k$ . Если  $E_k = E_k^{\text{ex}}$ , получаем утверждение теоремы.

Пусть  $E_k \neq E_k^{\text{ex}}$ . Тогда рассмотрим

$$\|\Psi_{E_k}\| = \|(\widehat{\mathcal{H}} - E_k)^{-1}(\widehat{\mathcal{H}} - E_k)\Psi_{E_k}\|_{L_2} \leq \|(\widehat{\mathcal{H}} - E_k)^{-1}\| \cdot \|(\widehat{\mathcal{H}} - E_k)\Psi_{E_k}\|.$$

Поскольку  $\|(\widehat{\mathcal{H}} - E_k)^{-1}\|_{L_2} = 1/d(E_k)$  и  $(\widehat{\mathcal{H}} - E_k)\Psi_{E_k} = f_k$ , то

$$|E_k^{\text{ex}} - E_k| = d(E_k) \leq \frac{\|f_k\|_{L_2}}{\|\Psi_{E_k}(x)\|_{L_2}} = \frac{\hbar^2 M}{\|\Psi_{E_k}\|} = \hbar^2 N,$$

что и требовалось доказать.

## 6. Канонический оператор (одномерный случай)

Для построения асимптотических решений, равномерных по  $x$  на всей оси  $Ox$ , нам пришлось сконструировать некоторый оператор, зависящий от параметра  $\hbar$  и отображающий пространство функций, определенных на заданной кривой  $\Lambda$  в фазовой плоскости  $xOp$ , на конфигурационное пространство. Для конструирования этого оператора, названного каноническим, кривая покрывалась интервалами (картами), взаимно однозначно проектирующимися на одну из координатных осей ( $Op$  или  $Ox$ ) и было введено понятие индекса цепочки карт на кривой. Вначале канонический оператор определялся локально (предканонический оператор) для каждого из таких интервалов, а потом с помощью разбиения единицы строился оператор для всей кривой  $\Lambda$ . Теперь мы рассмотрим эти конструкции более подробно.

Рассмотрим ограниченную несамопересекающуюся кривую  $\Lambda = \{x = X(\alpha), p = P(\alpha), \alpha \in [\alpha_1^0, \alpha_2^0]\}$  в фазовом пространстве.

◆ Точки кривой  $\Lambda$ , в которых выполняется условие  $dx/dp \neq 0$ , называются *неособыми*, а все остальные — *особыми*.

◆ Совокупность всех карт называется *каноническим атласом*  $A(\Lambda)$  кривой  $\Lambda$ .

◆ *Центральной точкой особой карты*  $\Omega_i$  называется произвольная особая точка этой карты; *центральной точкой неособой карты* называется любая ее точка.

Пусть множество особых точек  $\Sigma(\Lambda)$  конечно и при переходе через них производная  $dx/dp$  меняет знак.

◆ Индекс пути  $\ell[\alpha_1, \alpha_2] \subset \Lambda$  с началом в неособой точке  $\alpha_1$  и концом в неособой точке  $\alpha_2$  определяется следующим образом: если путь проходит через особую точку  $\alpha$  в направлении возрастания  $dx/dp$ , то к индексу прибавляется единица; если в противоположном направлении, то единица вычитается. Индекс пути  $\ell[\alpha_1, \alpha_2]$  обозначается символом  $\text{Ind } \ell[\alpha_1, \alpha_2]$ .

◇ Индекс Маслова для пути на  $\Lambda$  является целочисленным гомотопическим инвариантом [35]. Справедливо равенство  $\text{Ind } \ell[\alpha_1, \alpha_2] = \sigma(\Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_k)$ , где  $\Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_k$  — цепочка карт, соединяющая точку  $\alpha_0 \in \Omega_0$  с центральной точкой  $\alpha_k$  карты  $\Omega_k$ .

I. Если кривая  $\Lambda$  однозначно проектируется на ось  $Ox$ , то предканонический оператор определим следующим образом:

$$\begin{aligned} (\widehat{\mathcal{K}}_{\hbar, \Lambda}^{\gamma, \alpha_0} \varphi)(x) &= \widehat{\mathcal{K}}_{\hbar, \Lambda}^{\gamma, \alpha_0} \varphi(\alpha) = e^{i\gamma} \left| \frac{dX(\alpha)}{d\alpha} \right|_{\alpha=A(x)}^{-1/2} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_{\alpha_0}^{A(x)} p dx \right] \varphi(A(x)) = \\ &= e^{i\gamma} \int_{\Lambda} \left[ \frac{dX(\alpha)}{d\alpha} \right]^{1/2} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_{\alpha_0}^{\alpha} p dx \right] \delta(x - X(\alpha)) d\alpha, \end{aligned} \quad (6.1)$$

где  $\gamma$  — не зависящая от  $\alpha$  константа,  $\alpha_0 \in \Lambda$ , а  $\varphi(\alpha) \in L_2(\Lambda, d\alpha)$  — финитная бесконечно дифференцируемая функция с интегрируемым квадратом по мере  $d\alpha$ .

II. Если кривая  $\Lambda$  не проектируется однозначно на ось  $Ox$ , но проектируется однозначно на ось  $Op$ , оператор  $\widehat{\mathcal{K}}_{\hbar, \Lambda}^{\gamma, \alpha_0}$  определим соотношением

$$(\widehat{\mathcal{K}}_{\hbar, \Lambda}^{\gamma, \alpha_0} \varphi)(x) = \frac{e^{i\gamma}}{\sqrt{-2i\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \left| \frac{dP(\alpha)}{d\alpha} \right|_{\alpha=A(p)}^{-1/2} \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_{\alpha_0}^{A(p)} x dp \right) \varphi(A(p)) dp =$$

$$= \frac{e^{i\gamma}}{\sqrt{-2i\pi\hbar}} \int_{\Lambda} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( xP(\alpha) - \int_{\alpha_0}^{\alpha} x dp \right) \right] \varphi(\alpha) \sqrt{\frac{dP(\alpha)}{d\alpha}} d\alpha, \quad (6.2)$$

где  $\gamma$  — константа,  $\alpha_0$  — точка на кривой  $\Lambda$ , в которой  $dX(\alpha)/d\alpha \neq 0$ .

III. В случае произвольной кривой  $\Lambda$  покроем ее конечным числом таких интервалов  $\Omega_i$ , чтобы в каждом интервале  $\Omega_i$  либо  $dX(\alpha)/d\alpha \neq 0$ , либо  $dP(\alpha)/d\alpha \neq 0$  для всех его точек и  $dX(\alpha)/d\alpha$  обращалась в нуль в некоторой точке.

◇ Области типа I являются неособыми, а типа II — особыми.

◇ В особой области в качестве локальной координаты можно выбрать  $p$ , а в неособой —  $x$ .

Зафиксируем центральную точку одной из неособых карт. Будем считать ее начальной и сопоставим ей действительное число  $\gamma_0$ . Обозначим через  $e_j(\alpha)$  ( $j = \overline{1, N}$ ) разбиение единицы, подчиненное каноническому атласу  $A(\Lambda)$ :

$$\sum_{j=1}^N e_j(\alpha) = 1, \quad \text{supp } e_j(\alpha) \in \Omega_j, \quad j = \overline{1, N}. \quad (6.3)$$

Тогда любую финитную функцию  $\varphi(\alpha)$ ,  $\alpha \in [\alpha_1, \alpha_2]$ , можно представить в виде суммы

$$\varphi(\alpha) = \sum_{j=1}^N e_j(\alpha) \varphi(\alpha) \quad (6.4)$$

так, чтобы носитель каждого слагаемого принадлежал лишь одной карте атласа  $A(\Lambda)$ .

В общем случае канонический оператор определяется равенством

$$\widehat{\mathcal{K}}_{\hbar, \Lambda}^{\gamma, \alpha_0} \varphi(\alpha) = \sum_{j=1}^N \widehat{\mathcal{K}}_{\hbar, \Omega_j}^{\gamma_i, \alpha_0} e_j(\alpha) \varphi(\alpha), \quad \varphi(\alpha) \in L_2(\Lambda), \quad (6.5)$$

где предканонический оператор  $\widehat{\mathcal{K}}_{\hbar, \Omega_j}^{\gamma_i, \alpha_0}$  в карте  $\Omega_j$  определяется выражением (6.1), если карта неособая, и выражением (6.2), если карта особая. Положим в этих формулах

$$\gamma_j = \gamma_0 - \frac{\pi}{2} \text{ind } \ell[\alpha_0, \alpha_j], \quad (6.6)$$

где  $\alpha_j$  — центральная точка карты  $\Omega_j$ .

**Теорема 6.1.** *Если кривая  $\Lambda$  не замкнута, то канонический оператор с точностью до  $O(\hbar)$  не зависит от вида атласа  $A(\Lambda)$  и от выбора разбиения единицы, отвечающего атласу  $A(\Lambda)$ .*

**Пример 6.1.** Построить канонический оператор на лагранжевом многообразии  $\Lambda^1 = \{(p, x), x = y, p \in \mathbb{R}_p\}$ , где  $y \in \mathbb{R}$  — некоторая постоянная.

**Решение.** Канонический атлас состоит из одной карты  $\Omega : \{(p, x), x = y, p \in \mathbb{R}_p\}$ . Производящая функция многообразия  $\Lambda^1$  есть  $S(p) = -py$  и  $\partial S/\partial p = -y$ . Индекс карты  $\sigma(\Omega) = \text{const}$  по определению. В качестве инвариантной меры выберем  $d\alpha = dp$ , следовательно,  $d\alpha/dp = 1$ . Выберем разбиение единицы  $e(\Omega) = 1$ . Тогда, по определению,

$$\mathcal{K}_{\hbar, \Lambda^1}^{\gamma, \alpha_0} \varphi(\alpha) = \frac{e^{-i\pi\gamma/2}}{\sqrt{-2\pi i \hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip(x-y)/\hbar} \varphi(p) dp, \quad (6.7)$$

где  $\varphi(p) = \varphi(\alpha)|_{\alpha=p}$ , а  $\varphi(\alpha)$  – функция, определенная на  $\Lambda^1$ . В частном случае  $\varphi(\alpha) = 1$ ,  $\gamma = 0$  получим

$$\widehat{\mathcal{K}}_{\hbar, \Lambda^1}^{0, \alpha_0} 1 = \frac{1}{\sqrt{-2\pi i \hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip(x-y)/\hbar} dp = \delta(x-y). \quad (6.8)$$

**Теорема 6.2.** Если кривая  $\Lambda$  замкнута, то канонический оператор с точностью до  $O(\hbar)$  не зависит от вида атласа  $A(\Lambda)$  и от выбора разбиения единицы, если

$$\oint_{\Lambda(E)} p dq = (2n+1)\pi\hbar. \quad (6.9)$$

**Теорема 6.3.** Пусть  $\Lambda_n^1 = \{(p, x), p = P_n(\alpha), x = X_n(\alpha)\}$  – последовательность замкнутых кривых, удовлетворяющих уравнениям

$$\frac{dp}{d\alpha} = -\frac{\partial \mathcal{H}(p, x)}{\partial x}, \quad \frac{dx}{d\alpha} = \frac{\partial \mathcal{H}(p, x)}{\partial p}, \quad \mathcal{H}(p, x) = E_n, \quad (6.10)$$

где  $E_n$  – зависящие от  $\hbar$  числа, определяемые условием (6.9). Тогда существует зависящий от  $\hbar$  набор собственных значений  $\lambda = \lambda_n$  уравнения

$$\widehat{\mathcal{H}}\Psi_n = \lambda_n \Psi_n,$$

таких, что

$$|\lambda_n - E_n| = O(\hbar^2), \quad \|\Psi_n - \widehat{\mathcal{K}}_{\hbar, \Lambda_n^1}^{0, \alpha_0} \cdot 1\| = O(\hbar), \quad (6.11)$$

где  $\Psi_n$  – собственные функции, отвечающие  $\lambda_n$ .

Рассмотрим теперь нестационарое уравнение Шрёдингера

$$\{-i\hbar\partial_t + \widehat{\mathcal{H}}(t)\}\Psi = 0, \quad \widehat{\mathcal{H}}(t) = \mathcal{H}(\hat{p}, x, t, \hbar). \quad (6.12)$$

Поставим для него задачу Коши

$$\Psi|_{t=0} = \widehat{\mathcal{K}}_{\hbar, \Lambda^1}^{\gamma_0, \alpha_0} \varphi(\alpha). \quad (6.13)$$

**Теорема 6.4.** Решение задачи Коши (6.12), удовлетворяющее уравнению (6.11) с точностью до  $O(\hbar^2)$ , имеет вид

$$\Psi(x, t) = \widehat{\mathcal{K}}_{\hbar, \Lambda_t^1}^{\gamma, \alpha_0} \varphi(\alpha),$$

где

$$\gamma = \gamma_0 - \frac{\pi}{2} \text{Ind } X(t, \alpha_0) + \frac{1}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dx,$$

а  $\Lambda_t^1 = \hat{g}(t)\Lambda^1$  (см. рис. 16, 17), где  $\hat{g}(t)$  – оператор сдвига по траекториям гамильтоновой системы

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -\mathcal{H}_x(p, x, t, 0), & \dot{x} &= \mathcal{H}_p(p, x, t, 0), \\ x|_{t=0} &= X(\alpha), & p|_{t=0} &= P(\alpha). \end{aligned} \quad (6.14)$$

**Пример 6.2.** Найти фундаментальное решение задачи Коши

$$\left\{-i\hbar\partial_t - \frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\right\}G = 0, \quad G|_{t=0} = \delta(x-y). \quad (6.15)$$

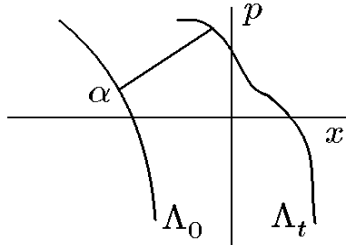


Рис. 16.

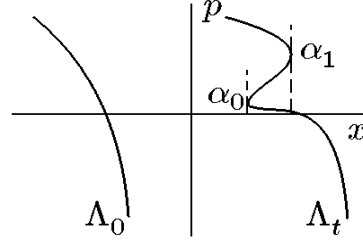


Рис. 17.

**Решение.** С учетом результатов примера 6.1 фундаментальное решение задачи (6.15) определится соотношением

$$G(x, y, t) = \mathcal{K}_{\hbar, \Lambda_t^1}^{\gamma, \alpha_0} 1,$$

где

$$\gamma = \gamma_0 - \frac{\pi}{2} \text{Ind } X(t, \alpha_0) + \frac{1}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dx.$$

Найдем многообразие  $\hat{g}(t)\Lambda_0^1 = \Lambda_t^1$  ( $\Lambda_0^1$  определено в примере 6.1).

Гамильтониан задачи имеет вид  $\mathcal{H}(p, x, t) = p^2/2m$ . Ему отвечает система Гамильтона

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}, \quad \frac{dp}{dt} = 0, \quad x|_{t=0} = \alpha, \quad p|_{t=0} = \frac{\partial S}{\partial x} = y.$$

Тогда

$$\Lambda : \left\{ (p, x), x = X(t, \alpha, y) = \frac{y}{m}t + \alpha, p = P(t, \alpha, y) = y \right\}.$$

В силу того, что

$$J(t, \alpha, y) = \frac{\partial X(t, \alpha, y)}{\partial \alpha} = 1,$$

решение  $S(x, t)$  существует для любого  $t \geq 0$ . Поскольку

$$\alpha = A(x, t, y) = x - \frac{yt}{m} \quad \text{и} \quad p \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} - \mathcal{H} = \frac{p^2}{2m},$$

то

$$S(x, t, y) = \left( y\alpha + \frac{1}{2m} \int_0^t P^2(p, \tau, \alpha, y) d\tau \right) \Big|_{\alpha=x-yt/m} = y \left( x - \frac{y}{m}t \right) + \frac{1}{2m} y^2 t = y \left( x - \frac{ty}{2m} \right).$$

Найдем

$$S(p, t, y) = py + \frac{1}{2m} \int_0^t p^2 d\tau = p \left( y - \frac{tp}{2m} \right).$$

С учетом (2.19) получим

$$\mathcal{K}_{\hbar, \Lambda_t^1}^{\gamma, \alpha_0} 1 = \frac{1}{\sqrt{-2\pi i \hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} e^{-(i/\hbar)(py - tp^2/2m)} dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar t}} e^{(i/\hbar)[m(x-y)^2/2t]}.$$

Окончательно запишем

$$G(x, y, t, \hbar) = \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{(x-y)^2}{2t} m \right\}.$$

## 7. Квазиклассическое представление

Мы уже отмечали, что квантовая механика должна в пределе при  $\hbar \rightarrow 0$  (в некотором смысле) переходить в классическую. При этом операторы координат  $\hat{x}_k$  и импульсов  $\hat{p}_k$  ( $k = \overline{1, n}$ ) переходят в операторы умножения на  $x_k$  и  $p_k$ , а оператор  $\hat{A}(t) = A(\hat{p}, \hat{x}, t, \hbar)$  — в оператор умножения на функцию  $A(p, x, t, 0)$ . Однако не все операторы допускают такой переход. Например, его не допускает оператор эволюции  $\hat{U}(t)$ . Действительно, в стационарном случае оператор эволюции определяется соотношением

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}t\right) \quad (7.1)$$

и ни в  $p$ -, ни в  $x$ -представлении не имеет предела при  $\hbar \rightarrow 0$ .

◆ Представление, к которому оператор эволюции имеет предел при  $\hbar \rightarrow 0$ , называется *квазиклассическим*.

Рассмотрим квантовую систему, описываемую одномерным уравнением Шрёдингера

$$\left\{-i\hbar\partial_t + \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)\right\}\Psi = 0. \quad (7.2)$$

В соответствующей классической системе координаты и импульсы связаны законом сохранения энергии

$$\frac{p^2}{2m} + V(x) = E, \quad (7.3)$$

а система Гамильтона имеет вид

$$\dot{p} = -V'_x(x), \quad \dot{x} = \frac{1}{m}p. \quad (7.4)$$

Из системы Гамильтона (7.4) следует, что классическое время выражается через импульс соотношением

$$\tau = m \int_0^x \frac{dx}{p(x)}, \quad \mathcal{P}(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}. \quad (7.5)$$

**Теорема 7.1.** *Оператор*

$$\widehat{M}(t) = \sqrt{\frac{m}{\mathcal{P}(x)}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\int_0^x \mathcal{P}(x)dx - Et\right]\right\}, \quad (7.6)$$

где  $E > V(x)$ , задает переход в квазиклассическое представление.

**Доказательство.** 1. Оператор (7.6) — унитарный оператор, действующий из пространства  $L_2$  в пространство  $\tilde{L}_2$ , где норма определяется по формуле

$$\|f\|_{\tilde{L}_2} = \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 \frac{m}{\mathcal{P}(x)} dx = \int_{-\infty}^{\infty} |f(x(\tau))|^2 d\tau. \quad (7.7)$$

Действительно, пусть  $\Psi_k(x, t) = \widehat{M}(t)f_k(x, t)$ ,  $k = 1, 2$ ,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_1(x, t) | \Psi_2(x, t) \rangle_{L_2} &= \langle \widehat{M}(t)f_1(x, t) | \widehat{M}(t)f_2(x, t) \rangle_{L_2} = \\ &= \langle f_1(x, t) | \widehat{M}^+(t)\widehat{M}(t) | f_2(x, t) \rangle_{L_2} = \langle f_1(x, t) | f_2(x, t) \rangle_{\tilde{L}_2}. \end{aligned}$$

Положив здесь  $\Psi_2(x, t) = \widehat{A}(t)\Psi_3(x, t)$ , найдем, что в  $M$ -представлении операторы преобразуются по правилу

$$\widehat{M}^{-1}(t)\widehat{A}(t)\widehat{M}(t) = \widehat{A}(t).$$

2. В построенном представлении основные операторы теории примут вид

$$\begin{aligned}\widehat{M}^{-1}(t)x\widehat{M}(t) &= x, \\ \widehat{M}^{-1}(t)\hat{p}\widehat{M}(t) &= \mathcal{P}(x) - i\hbar\sqrt{p(x)}\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\sqrt{\mathcal{P}(x)}}, \\ \widehat{M}^{-1}(t)\widehat{\mathcal{H}}\widehat{M}(t) &= E - i\hbar\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\mathcal{P}(x)}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{1}{\sqrt{\mathcal{P}(x)}},\end{aligned}\tag{7.8}$$

Здесь мы воспользовались соотношением (7.3) и обозначили

$$\frac{\partial}{\partial \tau} = \frac{p(x)}{m}\frac{\partial}{\partial x}.$$

Аналогично для оператора  $\widehat{U}(t)$  получим

$$\begin{aligned}\widehat{M}^{-1}(t)\widehat{U}(t)\widehat{M}(0) &= \widehat{M}^{-1}(t)e^{-i\widehat{\mathcal{H}}t/\hbar}\widehat{M}(0) = \widehat{M}^{-1}(t)e^{-i\widehat{\mathcal{H}}t/\hbar}\widehat{M}(t)\widehat{M}^{-1}(t)\widehat{M}(0) = \\ &= \exp\left\{\left[E - i\hbar\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\mathcal{P}(x)}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{1}{\sqrt{\mathcal{P}(x)}}\right]\left(\frac{it}{\hbar}\right)\right\}e^{-iEt/\hbar} = \\ &= \exp\left\{-t\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{i\hbar t}{2m}\sqrt{\mathcal{P}(x)}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{1}{\sqrt{\mathcal{P}(x)}}\right\}.\end{aligned}\tag{7.9}$$

Таким образом, в этом представлении в пределе  $\hbar \rightarrow 0$  операторы квантовой механики переходят в операторы классической механики, а оператор эволюции — в оператор сдвига по траекториям гамильтоновой системы

$$\hat{g}(t) = \exp\left\{-t\frac{\partial}{\partial \tau}\right\}, \quad \hat{g}(t)\varphi(\tau) = \varphi(\tau - t).$$

Рассмотрим многомерное уравнение Шрёдингера

$$\left\{-i\hbar\partial_t + \widehat{\mathcal{H}}(t)\right\}\Psi = 0;\tag{7.10}$$

$$\widehat{\mathcal{H}}(t) = \mathcal{H}(\hat{\vec{p}}, \vec{x}, t, \hbar) = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\vec{x}, t),$$

и отвечающую ему систему Гамильтона

$$\dot{\vec{x}} = \mathcal{H}_{\vec{p}}(\vec{p}, \vec{x}, t, 0), \quad \dot{\vec{p}} = -\mathcal{H}_{\vec{x}}(\vec{p}, \vec{x}, t, 0).\tag{7.11}$$

Если система (7.11) имеет  $n$ -параметрическое семейство решений  $\vec{x} = \vec{X}(t, \vec{\alpha})$ ,  $\vec{p} = \vec{P}(t, \vec{\alpha})$ ,  $\vec{\alpha} \in \mathbb{R}^n$ , однозначно проектирующееся на конфигурационное пространство, т.е.

$$J(t, \vec{\alpha}) = \frac{\partial(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)} \neq 0,\tag{7.12}$$

то оператор

$$\widehat{M}(t) = \left\{\frac{1}{\sqrt{J(t, \vec{\alpha})}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}S(t, \vec{\alpha})\right]\right\}\Big|_{\vec{\alpha}=\vec{A}(\vec{x}, t)}\tag{7.13}$$



задает переход в квазиклассическое представление. Здесь  $\vec{\alpha} = \vec{A}(\vec{x}, t)$  неявным образом определяется уравнением

$$\vec{x} = \vec{X}(t, \vec{\alpha}). \quad (7.14)$$

В этом представлении уравнение Шрёдингера (7.10) примет вид

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\partial\varphi}{\partial t} + \frac{\langle \nabla S, \nabla \varphi \rangle}{m} = \frac{i\hbar}{2m} J^{1/2} \Delta J^{-1/2} \varphi - \varphi \frac{\Delta S}{2m}.$$

Здесь левая часть есть производная по времени вдоль классической траектории. При  $\hbar = 0$  решение уравнения будет постоянно вдоль классической траектории.

Если перейти к переменным  $\vec{\alpha}$  и  $t$ , то

$$\varphi(\vec{x}, t) = \varphi(x(\vec{\alpha}, t), t) = \tilde{\varphi}(\vec{\alpha}, t)$$

и для уравнения (7.10) окончательно получим

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} J^{1/2} \Delta_{\alpha} [J^{-1/2} \tilde{\varphi}(\vec{\alpha}, t)] - \varphi \frac{\Delta_{\alpha} S}{2m},$$

где  $\Delta_{\alpha}$  — оператор Лапласа в координатах  $\vec{\alpha}$ . Преобразование, определяемое оператором (7.13) унитарно, т.е. функции  $\psi(\vec{x}, t)$  и  $\tilde{\varphi}(\vec{\alpha}, t)$  связаны соотношением

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\Psi(\vec{x}, t)|^2 d\vec{x} = \int_{\mathbb{R}^n} |\tilde{\varphi}(\vec{\alpha}, t)|^2 d\vec{\alpha}.$$

Оператор (7.13) задаёт переход от координатного представления к квазиклассическому.

## ГЛАВА 2

# Квазиклассически сосредоточенные состояния уравнения Шрёдингера

### 8. Класс траекторно сосредоточенных функций

**Предположение 1.** Пусть функция  $A(\vec{p}, \vec{x}, t, \hbar) \in C^\infty$ , где  $(\vec{p}, \vec{x}) \in \mathbb{R}_p^n \times \mathbb{R}_x^n$ , удовлетворяет при каждом фиксированном  $t \geq 0$  следующим условиям:

- 1) регулярно зависит от параметра  $\hbar$  в окрестности  $\hbar = 0$ ;
- 2) для произвольных мультииндексов  $\alpha$  и  $\beta$  существуют постоянные  $C_{\alpha\beta}$  и  $M$ , такие, что выполняется оценка (равномерная по  $t$  при  $\hbar \rightarrow 0$ )

$$\left| D_{\vec{p}}^\alpha D_{\vec{x}}^\beta A(\vec{p}, \vec{x}, t, \hbar) \right| \leq C_{\alpha\beta} (1 + |\vec{p}|^M) (1 + |\vec{x}|^M). \quad (8.1)$$

В уравнении Шрёдингера

$$[-i\hbar\partial_t + \widehat{\mathcal{H}}(t)]\Psi = 0, \quad (8.2)$$

где  $\widehat{\mathcal{H}}(t)$  — псевдодифференциальный оператор, символ которого удовлетворяет условиям предположения 1, обозначим

$$\hat{z} = (\hat{p}, \hat{x})^t = \|\hat{z}_a\|_{1 \times 2n}.$$

Здесь и далее латинские индексы  $a, b, c$  меняются от единицы до  $2n$ , а индексы  $i, j, k$  — от единицы до  $n$ . Тогда

$$\hat{z}_j = \hat{p}_j, \quad \hat{z}_{j+n} = x_j, \quad j = \overline{1, n}.$$

Операторы  $\hat{z}_a$  удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$[\hat{z}_a, \hat{z}_b] = i\hbar J_{ab}, \quad a, b = \overline{1, 2n}, \quad (8.3)$$

где  $J_{ab}$  — элементы единичной симплектической матрицы

$$J = \|J_{ab}\|_{2n \times 2n} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbb{I}_n \\ \mathbb{I}_n & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.4)$$

Мы уже отмечали, что если решение уравнения (8.2) искать в классе функций  $\Psi \in \mathcal{D}_0$ , т.е.

$$\Psi(\vec{x}, t, \hbar) = \Psi_0(\vec{x}, t) + \hbar\Psi_1(\vec{x}, t) + \dots,$$

регулярно зависящих от  $\hbar$ , то  $\Psi_k(\vec{x}, t) \equiv 0$  и не существует нетривиальных решений уравнения (8.2) в классе  $\mathcal{D}_0$ .

Если решение уравнения (8.2) искать в виде

$$\Psi(\vec{x}, t, \hbar) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(\vec{x}, t)\right\} f(\vec{x}, t, \hbar),$$

где

$$f(\vec{x}, t, \hbar) = f_0(\vec{x}, t) + \hbar f_1(\vec{x}, t) + \dots, \quad f \in \mathcal{D}_0,$$

а функция  $S(\vec{x}, t)$  вещественна:

$$S^*(\vec{x}, t) = S(\vec{x}, t),$$

то приходим к понятию канонического оператора Маслова, конструкция которого рассмотрена в главе «Метод канонического оператора Маслова для одномерного уравнения Шрёдингера».

В настоящем разделе введем класс функций, сингулярно зависящих от малого параметра  $\hbar$  и обобщающих понятия волнового пакета и уединенной волны, а также изучим его свойства. Оказывается, что в этом классе можно построить асимптотические решения широкого класса уравнений в частных производных, содержащих малый параметр  $\hbar$  при производных (в том числе и уравнение Шрёдингера (8.2)). Функции этого класса зависят от фазовой траектории  $z = Z(t, \hbar)$ , вещественной функции  $S(t, \hbar)$  и параметра  $\hbar$  и сосредоточены при  $\hbar \rightarrow 0$  в окрестности точки, движущейся вдоль заданной фазовой кривой  $z = Z(t, 0)$ . Такие функции хорошо известны в квантовой механике. К ним, в частности, относятся когерентные и «сжатые» состояния квантовых систем с квадратичным гамильтонианом.

Обозначим этот класс функций через  $\mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$  и определим его следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_\hbar^t = \mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar)) = & \left\{ \Phi : \Phi(\vec{x}, t, \hbar) = \varphi\left(\frac{\Delta\vec{x}}{\sqrt{\hbar}}, t, \hbar\right) \times \right. \\ & \left. \times \exp\left[\frac{i}{\hbar}(S(t, \hbar) + \langle \vec{P}(t, \hbar), \Delta\vec{x} \rangle)\right] \right\}, \end{aligned} \quad (8.5)$$

где функция  $\varphi(\vec{\xi}, t, \hbar)$  принадлежит пространству Шварца  $\mathbb{S}$  по переменной  $\vec{\xi} \in \mathbb{R}^n$ , гладким образом зависит от  $t$  и регулярно зависит от  $\sqrt{\hbar}$  при  $\hbar \rightarrow 0$ . Здесь  $\Delta\vec{x} = \vec{x} - \vec{X}(t, \hbar)$ , а вещественная функция  $S(t, \hbar)$  и  $2n$ -мерная вектор-функция  $Z(t, \hbar) = (\vec{P}(t, \hbar), \vec{X}(t, \hbar))$ , характеризующие класс  $\mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$ , регулярно зависят от  $\sqrt{\hbar}$  в окрестности  $\hbar = 0$  и *подлежат определению*. Там, где это не приводит к недоразумениям, вместо  $\mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$  будем использовать сокращенное обозначение  $\mathcal{P}_\hbar^t$ .

Функции класса  $\mathcal{P}_\hbar^t$  нормируемы в пространстве  $L_2(\mathbb{R}_x^n)$ .

Далее в выражении для нормы функций из класса  $\mathcal{P}_\hbar^t$  аргумент  $t$  может быть опущен:  $\|\Phi(t)\|^2 = \|\Phi\|^2$ .

Наряду с классом  $\mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$  для построения асимптотических решений полезно определить класс функций

$$\mathcal{C}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar)) = \left\{ \Phi : \Phi(\vec{x}, t, \hbar) = \varphi\left(\frac{\Delta\vec{x}}{\sqrt{\hbar}}, t\right) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(S(t, \hbar) + \langle \vec{P}(t, \hbar), \Delta\vec{x} \rangle)\right] \right\}, \quad (8.6)$$

где, в отличие от (8.5), функции  $\varphi$  не зависят от  $\hbar$ .

Функции, принадлежащие классу  $\mathcal{P}_\hbar^t$ , в любой фиксированный момент времени  $t \in \mathbb{R}^1$  *сосредоточены* при  $\hbar \rightarrow 0$  в окрестности точки, лежащей на фазовой кривой  $z = Z(t, 0)$ ,  $t \in \mathbb{R}^1$  (точный смысл этого свойства устанавливается ниже в теоремах 8.1–8.3). Поэтому функции класса  $\mathcal{P}_\hbar^t$  естественно назвать *траекторно сосредоточенными функциями*. В определение класса траекторно сосредоточенных функций входят в качестве свободных «параметров» фазовая траектория  $Z(t, \hbar)$  и скалярная функция  $S(t, \hbar)$ . Отметим здесь, что для линейного уравнения типа Шрёдингера (8.2) вектор-функция  $Z(t, 0)$  — главный член разложения по  $\hbar \rightarrow 0$  — определяет фазовую траекторию гамильтоновой системы с гамильтонианом  $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{x}, t)$ , а функция  $S(t, 0)$  есть классическое действие вдоль этой траектории. В частности, в этом случае классу  $\mathcal{P}_\hbar^t$  принадлежат хорошо известные динамические (сжатые) когерентные состояния квантовых систем с квадратичными гамильтонианами при выборе амплитуды  $\varphi$  из (8.5) в форме гауссовой экспоненты:

$$\varphi(\vec{\xi}, t) = \exp\left[\frac{i}{2}\langle \vec{\xi}, Q(t)\vec{\xi} \rangle\right] f(t),$$

где  $Q(t)$  — комплексная симметричная матрица с положительной мнимой частью, а временной множитель определяется выражением

$$f(t) = \sqrt[4]{\det \operatorname{Im} Q(t)} \exp \left[ -\frac{i}{2} \int_0^t \operatorname{Sp} \operatorname{Re} Q(\tau) d\tau \right].$$

Рассмотрим основные свойства траекторно сосредоточенных функций из класса  $\mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$ , справедливые также и для класса  $\mathcal{C}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$ .

**Теорема 8.1.** *На функциях класса  $\mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$  справедливы следующие асимптотические оценки для центрированных моментов  $\Delta_\alpha(t, \hbar)$  порядка  $|\alpha|$ ,  $\alpha \in \mathbb{Z}_+^{2n}$ :*

$$\Delta_\alpha(t, \hbar) = \frac{\langle \Phi | \{\Delta \hat{z}\}^\alpha | \Phi \rangle}{\|\Phi\|^2} = O(\hbar^{|\alpha|/2}), \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (8.7)$$

Здесь через  $\{\Delta \hat{z}\}^\alpha$  обозначен оператор с вейлевским символом  $(\Delta z)^\alpha$ ,

$$\Delta z = z - Z(t, \hbar) = (\Delta \vec{p}, \Delta \vec{x}), \quad \Delta \vec{p} = \vec{p} - \vec{P}(t, \hbar), \quad \Delta \vec{x} = \vec{x} - \vec{X}(t, \hbar).$$

**Доказательство.** Символ оператора  $\{\Delta \hat{z}\}^\alpha$  можно записать в виде

$$(\Delta z)^\alpha = (\Delta \vec{p})^{\alpha_p} (\Delta \vec{x})^{\alpha_x}, \quad (\alpha_p, \alpha_x) = \alpha,$$

и, следовательно, согласно определению упорядоченных по Вейлю псевдодифференциальных операторов, для среднего значения  $\sigma_\alpha(t, \hbar)$  оператора  $\{\Delta \hat{z}\}^\alpha$  имеем

$$\begin{aligned} \sigma_\alpha(t, \hbar) &= \langle \Phi | \{\Delta \hat{z}\}^\alpha | \Phi \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^{3n}} d\vec{x} d\vec{y} d\vec{p} \Phi^*(\vec{x}, t, \hbar) \times \\ &\times \exp\left(\frac{i}{\hbar} \langle (\vec{x} - \vec{y}), \vec{p} \rangle\right) [\Delta \vec{p}]^{\alpha_p} \left(\frac{\Delta \vec{x} + \Delta \vec{y}}{2}\right)^{\alpha_x} \Phi(\vec{y}, t, \hbar). \end{aligned}$$

Здесь обозначено

$$\Delta \vec{y} = \vec{y} - \vec{X}(t, \hbar).$$

После замены переменных

$$\Delta \vec{x} = \sqrt{\hbar} \vec{\xi}, \quad \Delta \vec{y} = \sqrt{\hbar} \vec{\zeta}, \quad \Delta \vec{p} = \sqrt{\hbar} \vec{\omega}$$

с учетом явного вида функций

$$\Phi(\vec{x}, t, \hbar) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (S(t, \hbar) + \langle \vec{P}(t, \hbar), \Delta \vec{x} \rangle) \right\} \varphi \left( \frac{\Delta \vec{x}}{\sqrt{\hbar}}, t, \hbar \right), \quad (8.8)$$

принадлежащих классу  $\mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$ , найдем

$$\begin{aligned} \sigma_\alpha(t, \hbar) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \hbar^{3n/2} \hbar^{|\alpha|/2} 2^{-|\alpha_n|} \int_{\mathbb{R}^{3n}} d\vec{\xi} d\vec{\zeta} d\vec{\omega} \varphi^*(\vec{\xi}, t, \hbar) \times \\ &\times \exp\{i \langle (\vec{\xi} - \vec{\zeta}), \vec{\omega} \rangle\} \vec{\omega}^{\alpha_p} (\vec{\xi} + \vec{\zeta})^{\alpha_x} \varphi(\vec{\zeta}, t, \hbar); \\ \|\Phi\|^2 &= \hbar^{n/2} \int_{\mathbb{R}^n} d\vec{\xi} \varphi^*(\vec{\xi}, t, \hbar) \varphi(\vec{\xi}, t, \hbar). \end{aligned}$$

Обозначим через

$$M_0(t, \hbar) = \frac{\|\Phi\|^2}{\hbar^{n/2}}, \quad M_\alpha(t, \hbar) = \frac{\sigma_\alpha(t, \hbar)}{\hbar^{(n+|\alpha|)/2}}$$

и учтем, что  $\varphi(\vec{\xi}, t, \hbar)$  зависит от  $\sqrt{\hbar}$  регулярно и  $M_0(t, \hbar) > 0$ . Следовательно,

$$\Delta_\alpha(t, \hbar) = \frac{\sigma_\alpha(t, \hbar)}{\|\Phi\|^2} = \hbar^{|\alpha|/2} \frac{M_\alpha(t, \hbar)}{M_0(t, \hbar)} \leq \hbar^{|\alpha|/2} \max_{t \in [0, T]} \frac{M_\alpha(t, \hbar)}{M_0(t, \hbar)} = O(\hbar^{|\alpha|/2}),$$

что и требовалось доказать.

Обозначим символом  $\widehat{O}(\hbar^\nu)$  оператор  $\widehat{F}$  такой, что для любой функции  $\Phi$ , принадлежащей пространству  $\mathcal{P}_\hbar^t(z(t, \hbar), S(t, \hbar))$ , справедлива асимптотическая оценка

$$\frac{\|\widehat{F}\Phi\|}{\|\Phi\|} = O(\hbar^\nu), \quad \hbar \rightarrow 0.$$

**Теорема 8.2.** Для функций, принадлежащих  $\mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$ , справедливы следующие асимптотические оценки:

$$\{\Delta \hat{z}\}^\alpha = \widehat{O}(\hbar^{|\alpha|/2}), \quad \alpha \in \mathbb{Z}_+^{2n}, \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (8.9)$$

**Доказательство** аналогично доказательству соотношения (8.7).

**Следствие 8.2.1.** Для траекторно сосредоточенных функций, принадлежащих  $\mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$ , справедливы следующие асимптотические оценки:

$$\begin{aligned} \widehat{R}_0 &= \{-i\hbar \partial_t - \dot{S}(t, \hbar) + \langle \vec{P}(t, \hbar), \dot{\vec{X}}(t, \hbar) \rangle + \langle \dot{Z}(t, \hbar), J\Delta \hat{z} \rangle\} = \\ &= -i\hbar \frac{d}{dt} - \dot{S}(t, \hbar) - \langle \dot{\vec{P}}(t, \hbar), \Delta \vec{x} \rangle = \widehat{O}(\hbar); \end{aligned} \quad (8.10)$$

$$\Delta \hat{x}_k = \widehat{O}(\sqrt{\hbar}), \quad \Delta \hat{p}_j = \widehat{O}(\sqrt{\hbar}), \quad k, j = \overline{1, n}. \quad (8.11)$$

Здесь  $\dot{S}(t, \hbar) = dS(t, \hbar)/dt$ , а

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \langle \dot{\vec{X}}(t, \hbar), \nabla \rangle$$

— производная вдоль траектории  $\vec{x} = \vec{X}(t, \hbar)$ .

**Доказательство.** Пусть  $\Psi \in \mathcal{P}_\hbar^t$ . Тогда

$$\begin{aligned} \widehat{R}_0 \Psi &= \{-i\hbar[\partial_t + \langle \dot{\vec{X}}(t, \hbar), \nabla \rangle] - \dot{S}(t, \hbar) - \langle \dot{\vec{P}}(t, \hbar), \Delta \vec{x} \rangle\} \Psi = \\ &= e^{i[S(t, \hbar) + \langle \vec{P}(t, \hbar), \Delta \vec{x} \rangle]/\hbar} \left\{ \dot{S}(t, \hbar) + \langle \dot{\vec{P}}(t, \hbar), \Delta \vec{x} \rangle - \langle \vec{p}, \dot{\vec{X}}(t, \hbar) \rangle - \right. \\ &\quad \left. -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \langle \langle \vec{p}, \dot{\vec{X}}(t, \hbar) \rangle - i\hbar \langle \dot{\vec{X}}(t, \hbar), \nabla \rangle - \dot{S}(t, \hbar) - \langle \dot{\vec{P}}(t, \hbar), \Delta \vec{x} \rangle \right\} \varphi\left(\frac{\Delta \vec{x}}{\sqrt{\hbar}}, t, \hbar\right) \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} \widehat{R}_0 \Psi &= e^{-i[S(t, \hbar) + \vec{p}(t, \hbar), \Delta \vec{x}]/\hbar} (-i\hbar) \left( \frac{\partial}{\partial t} + \langle \dot{\vec{X}}(t, \hbar), \nabla \rangle \right) \varphi\left(\frac{\Delta \vec{x}}{\sqrt{\hbar}}, t, \hbar\right) = \\ &= (-i\hbar) e^{-i[S(t, \hbar) + \vec{p}(t, \hbar), \Delta \vec{x}]/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \varphi\left(\frac{\Delta \vec{x}}{\sqrt{\hbar}}, t, \hbar\right) \Big|_{\Delta \vec{x} = \text{const}}. \end{aligned}$$

После замены переменной  $\Delta \vec{x} = \sqrt{\hbar} \vec{\xi}$  для квадрата нормы оператора  $\widehat{R}_0$  получим

$$\|\widehat{R}_0\Psi\|^2 = \hbar^{n/2}\hbar^2 \int_{\mathbb{R}^n} d\vec{\xi} \left| \frac{\partial\varphi(\vec{q}, t, \hbar)}{\partial t} \right|^2 = \hbar^2\hbar^{n/2} J_0(t, \hbar),$$

где  $J_0(t, \hbar)$  регулярно зависит от  $\hbar$ . Тогда

$$\frac{\|\widehat{R}_0\Psi\|}{\|\Psi\|} = \frac{\hbar^{n/4}\hbar\sqrt{J_0(t, \hbar)}}{\hbar^{n/4}\sqrt{I_0(t, \hbar)}} = O(\hbar), \quad \hbar \rightarrow 0.$$

Таким образом, оценка (8.10) доказана.

Оценки (8.11) следуют из оценок (8.9) как частный случай.

**Теорема 8.3.** *Для любой функции  $\Phi(\vec{x}, t, \hbar) \in \mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$  справедливы предельные соотношения*

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{\|\Phi\|^2} |\Phi(\vec{x}, t, \hbar)|^2 = \delta(\vec{x} - \vec{X}(t, 0)), \quad (8.12)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{\|\tilde{\Phi}\|^2} |\tilde{\Phi}(\vec{p}, t, \hbar)|^2 = \delta(\vec{p} - \vec{P}(t, 0)), \quad (8.13)$$

где  $\tilde{\Phi}(\vec{p}, t, \hbar) = F_{\hbar, \vec{x} \rightarrow \vec{p}} \Phi(\vec{x}, t, \hbar)$ ,  $F_{\hbar, \vec{x} \rightarrow \vec{p}} - \hbar^{-1}$ -преобразование Фурье [35].

**Доказательство.** Рассмотрим произвольную функцию  $\phi(\vec{x})$ , принадлежащую пространству Шварца  $\mathcal{S}$ . Тогда для любой функции  $\Phi(\vec{x}, t, \hbar) \in \mathcal{P}_\hbar^t$  интеграл

$$\left\langle \frac{|\Phi(t, \hbar)|^2}{\|\Phi(t, \hbar)\|^2} \middle| \phi \right\rangle = \frac{1}{\|\Phi(t, \hbar)\|^2} \int_{\mathbb{R}_x^n} \phi(\vec{x}) |\Phi(\vec{x}, t, \hbar)|^2 d\vec{x} = \frac{1}{\|\varphi(t, \hbar)\|^2} \int_{\mathbb{R}_x^n} \phi(\vec{x}) \left| \varphi\left(\frac{\Delta\vec{x}}{\sqrt{\hbar}}, t\right) \right|^2 d\vec{x}$$

после замены переменных  $\vec{\xi} = \Delta\vec{x}/\sqrt{\hbar}$  преобразуется к виду

$$\langle |\Phi(t, \hbar)|^2 | \phi \rangle = \frac{\hbar^{n/2}}{\|\varphi(t, \hbar)\|^2} \int_{\mathbb{R}_\xi^n} \phi(\vec{X}(t, \hbar) + \sqrt{\hbar}\vec{\xi}) |\varphi(\vec{\xi}, t, \hbar)|^2 d\vec{\xi}.$$

Перейдем в последнем равенстве к пределу при  $\hbar \rightarrow 0$  и с учетом того, что

$$\|\varphi(t, \hbar)\|^2 = \hbar^{n/2} \int_{\mathbb{R}_\xi^n} |\varphi(\vec{\xi}, t, \hbar)|^2 d\vec{\xi},$$

воспользовавшись регулярной зависимостью функции  $\varphi(\vec{\xi}, t, \hbar)$  от  $\sqrt{\hbar}$ , получим требуемое утверждение.

Доказательство соотношения (8.13) аналогично предыдущему, если заметить, что фурье-образ функции  $\Phi(\vec{x}, t, \hbar) \in \mathcal{P}_\hbar^t$  можно представить в виде

$$\tilde{\Phi}(\vec{p}, t, \hbar) = \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} [S(t, \hbar) - \langle \vec{p}, \vec{X}(t, \hbar) \rangle] \right\} \tilde{\varphi}\left(\frac{\vec{p} - \vec{P}(t, \hbar)}{\sqrt{\hbar}}, t, \hbar\right),$$

где

$$\tilde{\varphi}(\vec{\omega}, t, \hbar) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}_\xi^n} e^{-i\langle \vec{\omega}, \vec{\xi} \rangle} \varphi(\vec{\xi}, t, \hbar) d\vec{\xi}.$$

Обозначим через  $\langle \hat{L}(t) \rangle$  среднее значение самосопряженного в  $L_2(\mathbb{R}_x^n)$  оператора  $\hat{L}(t)$ ,  $t \in \mathbb{R}^1$ , вычисленное по функции  $\Phi(\vec{x}, t, \hbar) \in \mathcal{P}_\hbar^t$ . Тогда справедливо

**Следствие 8.3.1.** Для любой траекторно сосредоточенной функции  $\Phi(\vec{x}, t, \hbar) \in \mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$  и любого оператора  $\widehat{A}(t, \hbar)$ , вейлевский символ которого  $A(z, t, \hbar)$  удовлетворяет предположению 1, справедливо равенство

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle \widehat{A}(t, \hbar) \rangle = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{\|\Phi\|^2} \langle \Phi(\vec{x}, t, \hbar) | \widehat{A}(t, \hbar) | \Phi(\vec{x}, t, \hbar) \rangle = A(Z(t, 0), t, 0). \quad (8.14)$$

**Доказательство** аналогично доказательству соотношений (8.12) и (8.13).

◇ Соотношение (8.14) можно обобщить на случай матричных элементов оператора  $\widehat{A}$ , вычисленных по траекторно сосредоточенным функциям:

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle \Phi'(\vec{x}, t, \hbar) | \widehat{A}(t, \hbar) | \Phi(\vec{x}, t, \hbar) \rangle = A(Z(t, 0), t, 0) \lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle \Phi'(\vec{x}, t, \hbar) | \Phi(\vec{x}, t, \hbar) \rangle,$$

где  $\Phi, \Phi' \in \mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$ .

Введем следующее определение.

◆ Решение  $\Phi(\vec{x}, t, \hbar)$  уравнения (8.2) назовем *квазиклассически сосредоточенным при  $\hbar \rightarrow 0$  на фазовой траектории  $Z(t, \hbar)$* , если выполнены условия (8.12), (8.13).

◇ Полученные оценки (8.9) операторов  $\{\Delta \hat{z}\}^\alpha$  позволяют произвести согласованное разложение функций класса  $\mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$  и оператора уравнения (8.2) по степеням  $\sqrt{\hbar}$ . Это разложение порождает рекуррентную систему уравнений, определяющую искомое асимптотическое решение уравнения (8.2).

Для любой функции  $\Phi \in \mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$  справедливо представление

$$\Phi(\vec{x}, t, \hbar) = \sum_{k=0}^N \hbar^{k/2} \Phi^{(k)}(\vec{x}, t, \hbar) + O(\hbar^{(N+1)/2}), \quad (8.15)$$

где  $\Phi^{(k)}(\vec{x}, t, \hbar) \in \mathcal{C}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$ . Представление (8.15) естественно индуцирует разложение пространства траекторно сосредоточенных функций  $\mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$  в прямую сумму подпространств:

$$\mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar)) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} \mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar), l). \quad (8.16)$$

Здесь функции  $\Phi \in \mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar), l) \subset \mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$ , согласно (8.6), имеют оценку по норме

$$\frac{1}{\hbar^{n/2}} \|\Phi\|_{L_2(\mathbb{R}_x^n)} = \hbar^{l/2} \mu(t), \quad (8.17)$$

где функция  $\mu(t)$  не зависит от  $\hbar$  и непрерывно дифференцируема по  $t$ .

Аналогично доказательству оценок (8.9), (8.10) можно показать, что операторы  $\{\Delta \hat{z}\}^\alpha$ ,  $\widehat{R}_0$  не нарушают структуру разложения (8.15), (8.16), причем

$$\begin{aligned} \{\Delta \hat{z}\}^\alpha &: \mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar), l) \rightarrow \mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar), l + |\alpha|), \\ \widehat{R}_0 &: \mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar), l) \rightarrow \mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar), l + 2). \end{aligned} \quad (8.18)$$

◇ Из следствия 8.3.1 вытекает, что решение  $\Psi(\vec{x}, t, \hbar)$  уравнения (8.2), принадлежащее классу  $\mathcal{P}_\hbar^t$ , является квазиклассически сосредоточенным.

Предельный характер условий (8.12), (8.13) и асимптотический характер оценок (8.7)–(8.10), справедливых в классе траекторно сосредоточенных функций, позволяют строить квазиклассически сосредоточенные решения исходного уравнения *не точно*, а *приближенно*. При этом  $L_2$ -норма погрешности имеет порядок  $\hbar^\alpha$ ,  $\alpha > 1$  при  $\hbar \rightarrow 0$  на любом конечном временном интервале  $[0, T]$ .

Обозначим такое приближенное решение через  $\Psi_{\text{as}} = \Psi_{\text{as}}(\vec{x}, t, \hbar)$ . Оно удовлетворяет следующей задаче:

$$\left[ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \widehat{\mathcal{H}}(t) \right] \Psi_{\text{as}} = O(\hbar^\alpha), \quad (8.19)$$

$$\Psi_{\text{as}} \in \mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar), \hbar), \quad t \in [0, T], \quad (8.20)$$

где через  $O(\hbar^\alpha)$  обозначена функция  $g^{(\alpha)}(\vec{x}, t, \hbar)$  – «невязка» уравнения (8.2). Для невязки справедлива оценка

$$\max_{0 \leq t \leq T} \|g^{(\alpha)}(\vec{x}, t, \hbar)\| = O(\hbar^\alpha), \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (8.21)$$

Функцию  $\Psi_{\text{as}}(\vec{x}, t, \hbar)$ , удовлетворяющую задаче (8.19)–(8.21), будем также называть *квазиклассически сосредоточенным решением* (mod  $\hbar^\alpha$ ,  $\hbar \rightarrow 0$ ) уравнения типа Шрёдингера (8.2).

Квазиклассически сосредоточенные решения  $\Psi^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar)$  уравнения типа Шрёдингера приближенно описывают эволюцию начального состояния  $\Psi_0(\vec{x}, \hbar)$ , если оно выбрано в классе траекторно сосредоточенных функций  $\mathcal{P}_\hbar^0$ . Оператор  $\widehat{\mathcal{H}}(t)$ , входящий в уравнение типа Шрёдингера (8.2), оставляет инвариантным класс  $\mathcal{P}_\hbar^t$  на конечном временном интервале  $0 \leq t \leq T$ , поскольку его символ удовлетворяет предположению 1. Поэтому для построения квазиклассически сосредоточенных решений задачи Коши можно выбрать начальные условия в виде

$$\Psi(\vec{x}, t, \hbar)|_{t=0} = \Psi_0(\vec{x}, \hbar), \quad \Psi_0 \in \mathcal{P}_\hbar^0(z_0, S_0). \quad (8.22)$$

Функции из класса  $\mathcal{P}_\hbar^0$  имеют следующий вид:

$$\Psi_0(\vec{x}, \hbar) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S_0(\hbar) + \langle \vec{P}_0(\hbar), (\vec{x} - \vec{X}_0(\hbar)) \rangle] \right\} \varphi_0 \left( \frac{\vec{x} - \vec{X}_0(\hbar)}{\sqrt{\hbar}}, \hbar \right), \quad (8.23)$$

где  $\varphi_0(\vec{\xi}, \hbar) \in \mathbb{S}(\mathbb{R}_\xi^n)$ ;  $Z_0(\hbar) = (\vec{P}_0(\hbar), \vec{X}_0(\hbar))$  – произвольная точка фазового пространства  $\mathbb{R}_{px}^{2n}$ , а постоянную  $S_0(\hbar)$  без ограничения общности можно положить равной нулю.

Важными частными случаями начальных условий вида (8.23) являются

$$1) \quad \varphi_0(\vec{\xi}, \hbar) = e^{-\langle \vec{\xi}, A\vec{\xi} \rangle / 2},$$

где вещественная  $n \times n$ -матрица  $A$  положительно определена и симметрична. Тогда соотношение (8.23) определяет *гауссов пакет*;

$$2) \quad \varphi_0(\vec{\xi}, \hbar) = e^{i\langle \vec{\xi}, Q\vec{\xi} \rangle / 2} H_\nu(\text{Im } Q\vec{\xi}),$$

где комплексная  $n \times n$ -матрица  $Q$  симметрична и имеет положительно определенную мнимую часть  $\text{Im } Q$ , а  $H_\nu(\vec{\eta})$ ,  $\vec{\eta} \in \mathbb{R}^n$  – многомерные полиномы Эрмита мультииндекса  $\nu = (\nu_1, \dots, \nu_n)$  [10]. В этом случае, как мы увидим ниже, соотношение (8.23) определяет *фоковские состояния многомерного осциллятора*.

## 9. Квазиклассические асимптотики с комплексными фазами для нестационарного уравнения Шрёдингера

Выше через  $Z(t) = Z(t, \hbar) = (\vec{P}(t, \hbar), \vec{X}(t, \hbar))$ ,  $t \in [0, T]$ , обозначена кривая в фазовом пространстве. Разложим оператор  $\widehat{\mathcal{H}}(t)$  в ряд Тейлора по операторам  $\Delta \hat{z} = \hat{z} - Z(t)$ :



$$[-i\hbar\partial_t + \widehat{\mathcal{H}}_0(t) + \widehat{\mathcal{H}}_1(t)]\Psi = 0, \quad (9.1)$$

где

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{H}}_0(t) &= \mathcal{H}(t) + \langle \mathcal{H}_z(t), \Delta\hat{z} \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta\hat{z}, \mathcal{H}_{zz}(t) \Delta\hat{z} \rangle, \\ \widehat{\mathcal{H}}_1(t) &= \widehat{\mathcal{H}}(t) - \widehat{\mathcal{H}}_0(t), \end{aligned} \quad (9.2)$$

и обозначено

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(t) &= \mathcal{H}(Z(t), t), \quad \mathcal{H}_z(t) = \left\| \frac{\partial \mathcal{H}(Z(t), t)}{\partial z_a} \right\|_{2n \times 1}, \\ \mathcal{H}_{zz}(t) &= \left\| \frac{\partial^2 \mathcal{H}(Z(t), t)}{\partial z_a \partial z_b} \right\|_{2n \times 2n}. \end{aligned}$$

Запишем вспомогательное уравнение

$$[-i\hbar\partial_t + \widehat{\mathcal{H}}_0(t)]\Psi = 0, \quad (9.3)$$

решение которого будем искать в виде

$$\Psi(\vec{x}, t, \hbar) = \hat{a}(t)\Phi(\vec{x}, t, \hbar), \quad \hat{a}(t) = N_a \langle b(t), \Delta\hat{z} \rangle, \quad (9.4)$$

где оператор  $\hat{a}(t)$  линеен по операторам  $\Delta\hat{z}$ ;  $N_a$  — постоянная. Потребуем, чтобы функция  $\Phi(\vec{x}, t, \hbar)$  также была решением уравнения (9.3), т.е. чтобы оператор  $\hat{a}(t)$  был оператором симметрии уравнения (9.3):

$$-i\hbar \frac{\partial \hat{a}(t)}{\partial t} + [\widehat{\mathcal{H}}_0(t), \hat{a}(t)]_- = 0. \quad (9.5)$$

Из этого условия определим  $2n$ -вектор  $b(t)$  и  $2n$ -вектор  $Z(t)$ .

С учетом явного вида операторов  $\widehat{\mathcal{H}}_0(t)$  (9.2) и  $\hat{a}(t)$  (9.4) запишем

$$\begin{aligned} &-i\hbar \langle \dot{b}(t), \Delta\hat{z} \rangle + i\hbar \langle b(t), \dot{Z}(t) \rangle + \\ &+ \left[ \left\{ \mathcal{H}(t) + \langle \mathcal{H}_z(t), \Delta\hat{z} \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta\hat{z}, \mathcal{H}_{zz}(t) \Delta\hat{z} \rangle \right\}, \langle b(t), \Delta\hat{z} \rangle \right] = 0. \end{aligned}$$

С учетом коммутационного соотношения

$$[\Delta\hat{z}_a, \Delta\hat{z}_b] = i\hbar J_{ab},$$

которое следует из (8.3), получим

$$-i\hbar \langle \dot{b}(t), \Delta\hat{z} \rangle + i\hbar \langle b(t), \dot{Z}(t) \rangle + i\hbar \langle \mathcal{H}_z(t), Jb(t) \rangle + i\hbar \langle \Delta z, \mathcal{H}_{zz}(t) Jb(t) \rangle = 0$$

или

$$\langle b(t), [\dot{Z} - J\mathcal{H}_z(t)] \rangle + \langle \Delta\hat{z}, [-\dot{b} + \mathcal{H}_{zz}(t)Jb] \rangle = 0.$$

Последнее соотношение справедливо, если фазовая траектория  $z = Z(t)$  определяется системой уравнений

$$\dot{z} = J\mathcal{H}_z(z, t), \quad (9.6)$$

а вектор  $b$  — системой

$$\dot{b} = \mathcal{H}_{zz}(t)Jb.$$

Система уравнений (9.6) есть система Гамильтона. Обозначим  $b(t) = -Ja(t)$ . Тогда для определения  $2n$ -вектора  $a(t)$  получим систему уравнений

$$\dot{a} = J\mathcal{H}_{zz}(t)a, \quad (9.7)$$

которая играет ключевую роль в теории комплексного роста.

◆ Система (9.7) называется *системой в вариациях*.

Таким образом, оператор (9.4):

$$\hat{a}(t) = N_a \langle b(t), \Delta \hat{z} \rangle = N_a \langle a(t), J \Delta \hat{z} \rangle \quad (9.8)$$

является оператором симметрии для уравнения (9.3), если  $Z(t)$  — решение системы Гамильтона в (9.6), а  $a(t)$  — решение системы в вариациях (9.7). Если для заданного решения  $Z(t)$  системы Гамильтона (9.6) мы выберем  $2n$  линейно независимых решений  $a_k(t)$ ,  $k = \overline{1, 2n}$ , системы в вариациях (9.7), то получим  $2n$  операторов симметрии.

Частное решение уравнения Шрёдингера (9.3) будем искать в виде

$$\Psi(\vec{x}, t) = N_h \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \phi_0(t) + \hbar \phi_1(t) + \langle \vec{m}(t), \Delta \vec{x} \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta \vec{x}, Q(t) \Delta \vec{x} \rangle \right] \right\}, \quad (9.9)$$

где  $\Delta \vec{x} = \vec{x} - \vec{X}(t)$ , а функции  $\phi_0(t)$ ,  $\phi_1(t)$ ,  $n$ -вектор  $\vec{m}(t)$  и  $n \times n$  матрица<sup>1</sup>  $Q(t)$  подлежат определению.

Подставим (9.9) в (9.3):

$$\begin{aligned} & \Psi \left\{ \dot{\phi}_0(t) + \hbar \dot{\phi}_1(t) + \langle \dot{\vec{m}}(t), \Delta \vec{x} \rangle - \langle \vec{m}(t), \dot{\vec{X}} \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta \vec{x}, \dot{Q}(t) \Delta \vec{x} \rangle - \right. \\ & \quad - \langle \Delta \vec{x}, Q(t) \dot{\vec{X}} \rangle + \mathcal{H}(t) + \langle \mathcal{H}_{\vec{p}}(t), [-\vec{P}(t) + \vec{m}(t) + Q(t) \Delta \vec{x}] \rangle + \\ & \quad + \langle \mathcal{H}_{\vec{x}}(t), \Delta \vec{x} \rangle + \frac{1}{2} \left[ \langle \Delta \vec{x}, \mathcal{H}_{xx}(t) \Delta \vec{x} \rangle + \langle \Delta \vec{x}, \mathcal{H}_{xp}(t) [-\vec{P}(t) + \vec{m}(t) + Q(t) \Delta \vec{x}] \rangle + \right. \\ & \quad + \langle [\Delta \vec{p} + \vec{m}(t) + Q(t) \Delta \vec{x}], \mathcal{H}_{pp}(t) [-\vec{P}(t) + \vec{m}(t) + Q(t) \Delta \vec{x}] \rangle + \\ & \quad \left. + \langle [\Delta \vec{p} + \vec{m}(t) + Q(t) \Delta \vec{x}], \mathcal{H}_{px}(t) \Delta \vec{x} \rangle \right] \left. \right\} = 0. \end{aligned}$$

Приравняем коэффициенты при одинаковых степенях параметра  $\hbar$  и оператора  $\Delta \vec{x}$ . Получим

$$\begin{aligned} (\Delta \vec{x})^\alpha \hbar^0, \quad |\alpha| = 0: & \quad \dot{\phi}_0(t) - \langle \vec{m}(t), \dot{\vec{X}} \rangle + \mathcal{H}(t) + \langle \mathcal{H}_{\vec{p}}(t), [\vec{m}(t) - \vec{P}(t)] \rangle + \\ & \quad + \frac{1}{2} \langle [\vec{m}(t) - \vec{P}(t)], \mathcal{H}_{pp}(t) [\vec{m}(t) - \vec{P}(t)] \rangle = 0; \\ (\Delta \vec{x})^\alpha \hbar^1, \quad |\alpha| = 0: & \quad \dot{\phi}_1(t) - \frac{i}{2} \text{Sp} [\mathcal{H}_{px}(t) + \mathcal{H}_{pp}(t) Q(t)] = 0; \\ (\Delta \vec{x})^\alpha \hbar^0, \quad |\alpha| = 1: & \quad \langle \Delta \vec{x}, \{ \dot{\vec{m}}(t) + \mathcal{H}_{\vec{x}}(t) + Q(t) \mathcal{H}_{\vec{p}}(t) - Q(t) \dot{\vec{X}}(t) + \\ & \quad + \mathcal{H}_{xp}(t) [\vec{m}(t) - \vec{P}(t)] + Q(t) \mathcal{H}_{pp}(t) [\vec{m}(t) - \vec{P}(t)] \} \rangle = 0; \\ (\Delta \vec{x})^\alpha \hbar^0, \quad |\alpha| = 2: & \quad \langle \Delta \vec{x}, [\dot{Q}(t) + \mathcal{H}_{xx}(t) + \mathcal{H}_{xp}(t) Q(t) + Q(t) \mathcal{H}_{px}(t) + \\ & \quad + Q(t) \mathcal{H}_{pp}(t) Q(t)] \Delta \vec{x} \rangle = 0. \end{aligned}$$

Если положить  $\vec{m}(t) = \vec{P}(t)$ , то третье уравнение будет выполняться тождественно. В результате получим

$$\phi_0(t) = \int_0^t [\langle \vec{P}(t) \dot{\vec{X}}(t) \rangle - \mathcal{H}(t)] dt, \quad (9.10)$$

$$\phi_1(t) = \frac{i}{2} \int_0^t \text{Sp} [\mathcal{H}_{px}(t) + \mathcal{H}_{pp}(t) Q(t)] dt. \quad (9.11)$$

<sup>1</sup>Здесь и в дальнейшем, если не оговорено противное, матрицу  $Q(t)$  считаем симметричной.

Для определения матрицы  $Q(t)$  получим матричное уравнение типа Рикатти

$$\dot{Q}(t) + \mathcal{H}_{xx}(t) + Q(t)\mathcal{H}_{px}(t) + \mathcal{H}_{xp}(t)Q(t) + Q(t)\mathcal{H}_{pp}(t)Q(t) = 0. \quad (9.12)$$

Ниже мы покажем, что между матрицей  $Q(t)$  (9.12) и функцией  $\phi_1(t)$  (9.11) существует связь. Более того, для определения главного члена асимптотики достаточно знать соответствующие решения системы Гамильтона и системы в вариациях, к изучению свойств которой мы и переходим.

## 10. Система в вариациях

Для построения решения уравнения (9.3) в классе  $\mathcal{P}_h^t$  необходимо найти решения системы в вариациях (9.7) и матричного уравнения типа Рикатти (9.12).

Рассмотрим произвольное решение системы в вариациях —  $2n$ -вектор  $a(t)$  и представим его в виде

$$a(t) = (\vec{W}(t), \vec{Z}(t)),$$

где  $n$ -вектор  $\vec{W}(t)$  называют «импульсной», а  $\vec{Z}(t)$  — «координатной» частью решения системы в вариациях. Тогда эту систему можно записать следующим образом:

$$\begin{cases} \dot{\vec{W}} = -\mathcal{H}_{xp}(t)\vec{W} - \mathcal{H}_{xx}(t)\vec{Z}, \\ \dot{\vec{Z}} = \mathcal{H}_{pp}(t)\vec{W} + \mathcal{H}_{px}(t)\vec{Z}. \end{cases} \quad (10.1)$$

◆ Систему уравнений (10.1) называют *системой в вариациях в векторной форме*.

Обозначим через  $B(t)$  и  $C(t)$   $n \times n$  матрицы, составленные из «импульсных» и «координатных» частей решения системы в вариациях:

$$\begin{aligned} B(t) &= (\vec{W}_1(t), \vec{W}_2(t), \dots, \vec{W}_n(t)), \\ C(t) &= (\vec{Z}_1(t), \vec{Z}_2(t), \dots, \vec{Z}_n(t)). \end{aligned} \quad (10.2)$$

Тогда матрицы  $B(t)$  и  $C(t)$  удовлетворяют системе уравнений

$$\begin{cases} \dot{B} = -\mathcal{H}_{xp}(t)B - \mathcal{H}_{xx}(t)C, \\ \dot{C} = \mathcal{H}_{pp}(t)B + \mathcal{H}_{px}(t)C. \end{cases} \quad (10.3)$$

◆ Систему уравнений (10.3) называют *системой в вариациях в матричной форме*.

◇ Поясним происхождение названия «система в вариациях». Для этого зафиксируем произвольное решение

$$Z(t, z_0) = (\vec{P}(t, z_0), \vec{X}(t, z_0)), \quad z_0 = (\vec{p}_0, \vec{x}_0) \in \mathbb{R}_{px}^{2n}, \quad t \in \mathbb{R},$$

канонической системы Гамильтона (9.6) с начальными условиями

$$\vec{p}(0, z_0) = \vec{p}_0, \quad \vec{x}(0, z_0) = \vec{x}_0.$$

Точка  $z_0 = (\vec{p}_0, \vec{x}_0)$  определяет начальное положение классической частицы в фазовом пространстве  $\mathbb{R}_{px}^{2n} = \mathbb{R}_p^n \times \mathbb{R}_x^n$  системы (9.6). В  $2n$ -мерном комплексном пространстве  $\mathbb{C}_a^{2n}$  с координатами

$$a = (\vec{W}, \vec{Z}), \quad \vec{W} = (W_1, \dots, W_n), \quad \vec{Z} = (Z_1, \dots, Z_n)$$

запишем систему в вариациях. Для этого линеаризуем систему Гамильтона (9.6) в окрестности кривой  $z = Z(t, z_0)$ , т.е. решение системы (9.6) будем искать в виде

$$Z^{(1)}(t) = Z(t, z_0) + \delta z(t), \quad \delta z(t) = \varepsilon a(t), \quad \varepsilon \ll 1. \quad (10.4)$$

Подставив (10.4) в (9.6) и отбросив слагаемые  $\sim \varepsilon^2$ , получим систему уравнений (9.7).

Рассмотрим некоторые свойства решений системы в вариациях.

◆ Комплексное число, которое ставится в соответствие каждой паре  $2n$ -мерных векторов  $a_k \in \mathbb{C}^{2n}$  по правилу  $\{a_1, a_2\} = \langle a_1, Ja_2 \rangle$ , называется *кососкалярным произведением векторов*  $a_1$  и  $a_2$ .

Очевидно, что кососкалярное произведение антисимметрично:

$$\{a_1, a_2\} = -\{a_2, a_1\}.$$

**Свойство 10.1.** Система в вариациях (9.7) есть линейная гамильтонова система.

**Доказательство.** Линейность системы очевидна, а гамильтоновость следует из того, что функция

$$H(a, t) = \frac{1}{2} \langle a, \mathcal{H}_{zz}(t)a \rangle$$

является функцией Гамильтона для системы (9.7).

**Свойство 10.2.** Пусть  $a_1(t)$ ,  $a_2(t)$  — два решения системы в вариациях (9.7). Тогда их кососкалярное произведение не зависит от времени, т.е.

$$\{a_1(t), a_2(t)\} = \{a_1(0), a_2(0)\} = \text{const}. \quad (10.5)$$

$$\{a_1(t), a_2^*(t)\} = \{a_1(0), a_2^*(0)\} = \text{const}. \quad (10.6)$$

**Доказательство.** Продифференцируем:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \{a_1(t), a_2(t)\} &= \langle \dot{a}_1(t), Ja_2(t) \rangle + \langle a_1(t), J\dot{a}_2(t) \rangle = \\ &= \langle J\mathcal{H}_{zz}(t)a_1(t), Ja_2(t) \rangle + \langle a_1(t), JJ\mathcal{H}_{zz}(t)a_2(t) \rangle = \\ &= \langle a_1(t), \mathcal{H}_{zz}(t)a_2(t) \rangle - \langle a_1(t), \mathcal{H}_{zz}(t)a_2(t) \rangle = 0. \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались тем, что  $J^2 = -\mathbb{I}$  и  $J^\top = -J$ . Соотношение (10.6) следует из (10.5), поскольку  $a_2^*(t)$  — также решение системы в вариациях в силу её вещественности и линейности.

**Свойство 10.3.** Пусть матрицы  $B(t)$  и  $C(t)$  — некоторые решения системы в вариациях (10.3), тогда матрицы

$$D_0 = \frac{1}{2i} [C^+(t)B(t) - B^+(t)C(t)], \quad (10.7)$$

$$\tilde{D}_0 = C^\top(t)B(t) - B^\top(t)C(t) \quad (10.8)$$

не зависят от времени, т.е.

$$\begin{aligned} D_0 &= \frac{1}{2i} [C^+(0)B(0) - B^+(0)C(0)], \\ \tilde{D}_0 &= C^\top(0)B(0) - B^\top(0)C(0). \end{aligned}$$

**Доказательство.** Действительно,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [C^+(t)B(t) - B^+(t)C(t)] &= \dot{C}^+B + C^+\dot{B} - \dot{B}^+C - B^+\dot{C} = \\ &= (B^+\mathcal{H}_{pp}(t) + C^+\mathcal{H}_{xp}(t))B + C^+(-\mathcal{H}_{xp}(t)B - \mathcal{H}_{xx}(t)C) - \end{aligned}$$



**Свойство 10.4.** Пусть  $n \times n$ -матрицы  $B(t)$  и  $C(t)$  являются решениями системы в вариациях (10.3). Тогда если  $\det C(t) \neq 0$ ,  $t \in [0, T]$ , то симметричная матрица  $Q(t) = B(t)C^{-1}(t)$  удовлетворяет матричному уравнению Рикатти (9.12).

**Доказательство.** Действительно, из  $C^{-1}(t)C(t) = \mathbb{I}$  следует

$$\dot{C}^{-1}(t)C(t) + C^{-1}(t)\dot{C}(t) = 0$$

и

$$\dot{C}^{-1}(t) = -C^{-1}(t)\dot{C}(t)C^{-1}(t).$$

Тогда

$$\begin{aligned} \dot{Q} &= \dot{B}(t)C^{-1}(t) + B(t)\dot{C}^{-1}(t) = \dot{B}(t)C^{-1}(t) - Q(t)\dot{C}(t)C^{-1}(t) = \\ &= [-\mathcal{H}_{xp}(t)B - \mathcal{H}_{xx}(t)C]C^{-1} - Q[\mathcal{H}_{pp}(t)B + \mathcal{H}_{px}(t)C]C^{-1} = \\ &= -\mathcal{H}_{xp}(t)Q - \mathcal{H}_{xx}(t) - Q\mathcal{H}_{pp}(t)Q - Q\mathcal{H}_{px}(t), \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

**Свойство 10.5.** Матрица  $Q^{-1}(t) = C(t)B^{-1}(t)$  удовлетворяет уравнению

$$-\dot{Q}^{-1} + Q^{-1}\mathcal{H}_{xx}(t)Q^{-1} + \mathcal{H}_{px}(t)Q^{-1} + Q^{-1}\mathcal{H}_{xp}(t) + \mathcal{H}_{pp}(t) = 0. \quad (10.14)$$

**Доказательство** аналогично доказательству предыдущего свойства.

**Свойство 10.6.** Если  $Q(0) = Q^{\top}(0)$  при  $t = 0$ , то матрица  $Q(t) = B(t)C^{-1}(t)$  симметрична, т.е.

$$Q(t) = Q^{\top}(t). \quad (10.15)$$

Здесь через  $A^{\top}$  обозначена матрица, транспонированная к матрице  $A$ .

**Доказательство.** Действительно, из (9.12) следует, что

$$\dot{Q}^{\top} + \mathcal{H}_{xx}^{\top}(t) + \mathcal{H}_{px}^{\top}(t)Q^{\top} + Q^{\top}\mathcal{H}_{xp}^{\top}(t) + Q^{\top}\mathcal{H}_{pp}^{\top}(t)Q^{\top} = 0,$$

но

$$\mathcal{H}_{xx} = \mathcal{H}_{xx}^{\top}, \quad \mathcal{H}_{pp} = \mathcal{H}_{pp}^{\top}, \quad \mathcal{H}_{px} = \mathcal{H}_{xp}^{\top}.$$

Следовательно, матрица  $Q^{\top}(t)$  удовлетворяет уравнению (9.12) с тем же начальным условием, что и матрица  $Q(t)$ , так как по условию  $Q^{\top}(0) = Q(0)$ . Из единственности решения задачи Коши следует справедливость утверждения.

**Свойство 10.7.** Пусть справедливы предположения свойства 10.3. Тогда мнимые части матриц  $Q(t)$  и  $Q^{-1}(t)$  можно представить в виде

$$\operatorname{Im} Q(t) = (C^{+}(t))^{-1}D_0C^{-1}(t), \quad (10.16)$$

$$\operatorname{Im} Q^{-1}(t) = -(B^{-1}(t))^{+}D_0B^{-1}(t). \quad (10.17)$$

**Доказательство.** По определению

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} Q(t) &= \frac{i}{2}[Q^{+}(t) - Q(t)] = \frac{i}{2}[(B(t)C^{-1}(t))^{+} - B(t)C^{-1}(t)] = \\ &= \frac{i}{2}(C^{+}(t))^{-1}[B^{+}(t)C(t) - C^{+}(t)B(t)]C^{-1}(t) = (C^{+}(t))^{-1}D_0C^{-1}(t), \end{aligned}$$

что и требовалось доказать. Аналогично доказывается соотношение (10.17).

**Свойство 10.8.** Если матрица  $D_0$  диагональна и положительно определена<sup>2</sup> и  $\det C(t) \neq 0$ , то матрица  $\text{Im } Q(t)$  также положительно определена.

**Доказательство.** Пусть  $D_0 = \text{diag}(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ ,  $\alpha_j > 0$ ,  $j = \overline{1, n}$ . Обозначим через  $\vec{y}_j^\top$  строки матрицы  $C^{-1}(t)$ :

$$C^{-1}(t) = \begin{pmatrix} \vec{y}_1^\top(t) \\ \vec{y}_2^\top(t) \\ \dots \\ \vec{y}_n^\top(t) \end{pmatrix}. \quad (10.18)$$

Тогда для произвольного комплексного вектора  $|\vec{p}\rangle \neq 0$  получим

$$(\vec{p})^+ \text{Im } Q(t) \vec{p} = \sum_{j=1}^n \langle \vec{p}, \vec{y}_j(t) \rangle^+ \alpha_j \langle \vec{y}_j(t), \vec{p} \rangle = \sum_{j=1}^n \alpha_j |\langle \vec{p}, \vec{y}_j(t) \rangle|^2 > 0.$$

Последнее неравенство верно, поскольку  $|\vec{y}_j(t)| \neq 0$  и  $\alpha_j > 0$ ,  $j = \overline{1, n}$ . Из него в силу произвольности вектора  $\vec{p} \in \mathbb{C}^n$ ,  $|\vec{p}\rangle \neq 0$ , следует справедливость утверждения.

**Свойство 10.9 (лемма Лиувилля).** Если  $Q(t)$  непрерывна, то справедливо соотношение

$$\exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_0^t \text{Sp} [\mathcal{H}_{pp}(t)Q(t) + \mathcal{H}_{px}(t)] dt \right\} = \sqrt{\frac{\det C(0)}{\det C(t)}}. \quad (10.19)$$

**Доказательство.** Из (10.3) следует, что

$$\dot{C} = [\mathcal{H}_{pp}(t)Q(t) + \mathcal{H}_{px}(t)]C, \quad (10.20)$$

где матрица  $Q(t)$  — решение уравнения (9.12), а матрицы  $\mathcal{H}_{pp}(t)$  и  $\mathcal{H}_{px}(t)$  непрерывны. Тогда для матрицы  $C(t)$  справедливо тождество Якоби (см. например [15]):

$$\det C(t) = [\det C(0)] \exp \int_0^t \text{Sp} [\mathcal{H}_{pp}(t)Q(t) + \mathcal{H}_{px}(t)] dt.$$

Возводя левую и правую части равенства в степень  $-1/2$ , получим (10.19), что и требовалось доказать.

**Свойство 10.10.** Если матрица  $D_0$  (10.7) положительно определена, то матрица  $C(t)$  невырождена:

$$\det C(t) \neq 0. \quad (10.21)$$

**Доказательство.** Пусть существует такое  $t_1$ , что  $\det C(t_1) = 0$ . Тогда существует такой вектор  $\vec{k}$ ,  $|\vec{k}\rangle \neq 0$ , что

$$C(t_1)\vec{k} = 0, \quad (\vec{k}^+ C^+(t_1) = 0).$$

Поскольку соотношения (10.7), (10.8) справедливы для любого  $t$ , то

$$\vec{k}^+ D_0 \vec{k} = \vec{k}^+ \left\{ \frac{i}{2} [B^+(t_1)C(t_1) - C^+(t_1)B(t_1)] \right\} \vec{k} = 0.$$

Однако, по условию, матрица  $D_0$  положительно определена, и, следовательно, последнее равенство возможно только при  $|\vec{k}\rangle = 0$ . Полученное противоречие доказывает свойство.

<sup>2</sup> $n \times n$ -матрица  $A$  называется положительно определенной, если для всех  $\vec{z} \in \mathbb{C}^n$ ,  $|\vec{z}\rangle \neq 0$  справедливо  $\vec{z}^+ A \vec{z} > 0$  (см., например, [15]).

**Свойство 10.11.** Если матрица  $D_0$  (10.7) положительно определена и симметрична, а матрица  $\tilde{D}_0$  (10.8) – нулевая, то справедливы следующие соотношения:

$$\begin{aligned} C^*(t)D_0^{-1}B^\Gamma(t) - C(t)D_0^{-1}B^+(t) = \\ B(t)D_0^{-1}C^+(t) - B^*(t)D_0^{-1}C^\Gamma(t) = 2i\mathbb{I}_{n \times n}, \end{aligned} \quad (10.22)$$

$$\begin{aligned} C^*(t)D_0^{-1}C^\Gamma(t) - C(t)D_0^{-1}C^+(t) = \\ B(t)D_0^{-1}B^+(t) - B^*(t)D_0^{-1}B^\Gamma(t) = 0_{n \times n}. \end{aligned} \quad (10.23)$$

**Доказательство.** Рассмотрим вспомогательную матрицу  $T(t)$  размера  $2n \times 2n$

$$T(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} (D_0^{-1/2})^* & 0 \\ 0 & D_0^{-1/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C^\Gamma(t) & B^\Gamma(t) \\ C^+(t) & B^+(t) \end{pmatrix} \quad (10.24)$$

и найдем обратную к ней. Непосредственной проверкой убеждаемся, что

$$T^{-1}(t) = -\frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -B^*(t) & B(t) \\ C^*(t) & -C(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (D_0^{-1/2})^* & 0 \\ 0 & D_0^{-1/2} \end{pmatrix}. \quad (10.25)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} T(t)T^{-1}(t) &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} (D_0^{-1/2})^* & 0 \\ 0 & D_0^{-1/2} \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} -C^\Gamma(t)B^*(t) + B^\Gamma(t)C^*(t) & C^\Gamma(t)B(t) - B^\Gamma(t)C(t) \\ -C^+(t)B^*(t) + B^+(t)C^*(t) & C^+(t)B(t) - B^+(t)C(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (D_0^{-1/2})^* & 0 \\ 0 & D_0^{-1/2} \end{pmatrix} = \\ &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} -(D_0^{-1/2})^*(2iD_0)^*(D_0^{-1/2})^* & (D_0^{-1/2})^*\tilde{D}_0D_0^{-1/2} \\ -(D_0^{-1/2})\tilde{D}_0^*(D_0^{-1/2})^* & 2iD_0^{-1/2}D_0D_0^{-1/2} \end{pmatrix} = \mathbb{I}_{2n \times 2n}. \end{aligned}$$

Из единственности обратной матрицы [15] следует

$$T(t)T^{-1}(t) = T^{-1}(t)T(t) = \mathbb{I}_{2n \times 2n},$$

т.е.

$$\begin{aligned} T^{-1}(t)T(t) &= \\ &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} -(BD_0^{-1})^*C^\Gamma + BD_0^{-1}C^+ & -(BD_0^{-1})^*B^\Gamma + BD_0^{-1}B^+ \\ (CD_0^{-1})^*C^\Gamma - CD_0^{-1}C^+ & (CD_0^{-1})^*B^\Gamma - CD_0^{-1}B^+ \end{pmatrix} = \mathbb{I}_{2n \times 2n}. \end{aligned} \quad (10.26)$$

Но, по условию,  $D_0^\Gamma = D_0$ , а из определения (10.7) следует

$$D_0^+ = -\frac{1}{2i}(C^+B - B^+C)^+ = -\frac{1}{2i}(B^+C - C^+B) = D_0.$$

Следовательно,  $D_0^* = D_0$ , а значит, и  $(D_0^{-1})^* = D_0^{-1}$ . Тогда из (10.26) получим (10.22) и (10.23).

**Свойство 10.12.** Пусть матрица  $Q(t)$  определена и симметрична, а  $\vec{y}_j^\Gamma(t)$ ,  $j = \overline{1, n}$ , – строки матрицы  $C^{-1}(t)$  (10.19), тогда векторы  $\vec{y}_j^\Gamma(t)$  удовлетворяют системе уравнений

$$\dot{\vec{y}} = -\mathcal{H}_{xp}(t)\vec{y} - Q(t)\mathcal{H}_{pp}(t)\vec{y}. \quad (10.27)$$

**Доказательство.** Действительно,

$$\dot{C}^{-1} = -C^{-1}\dot{C}C^{-1}.$$

Подставив в последнее равенство  $\dot{C}$  из (10.20), получим

$$\dot{C}^{-1} = -C^{-1}[\mathcal{H}_{pp}(t)Q(t) + \mathcal{H}_{px}(t)]. \quad (10.28)$$

Транспонируя соотношение (10.28) для векторов  $\vec{y}(t)$  (10.19), получим уравнение (10.27), что и требовалось доказать.



**Свойство 10.13.** Если матрица

$$Q^{-1}(t) = C(t)B^{-1}(t)$$

определена и симметрична, то матрица  $B^{-1}$  удовлетворяет уравнению

$$\dot{B}^{-1} = B^{-1}[\mathcal{H}_{xx}(t)Q^{-1}(t) + \mathcal{H}_{xp}(t)] \quad (10.29)$$

(доказательство аналогично доказательству свойства 10.12).

**Свойство 10.14.** Если матрица  $D_0$  (10.7) положительно определена, то справедливо соотношение

$$-2iC^{-1}(t)\mathcal{H}_{pp}(t)(C^{-1}(t))^\top = \frac{d}{dt}[D_0^{-1}C^+(t)(C^\top(t))^{-1}]. \quad (10.30)$$

**Доказательство.** Действительно,

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt}[D_0^{-1}C^+(t)(C^\top(t))^{-1}] = D_0^{-1}[\dot{C}^{-1}(t)C^*(t) + C^{-1}(t)\dot{C}^*(t)]^\top = \\ & = D_0^{-1}[-C^{-1}(t)[\mathcal{H}_{pp}(t)Q(t) + \mathcal{H}_{px}(t)]C^*(t) + C^{-1}(t)[\mathcal{H}_{pp}(t)Q^*(t) + \mathcal{H}_{px}(t)]C^*(t)]^\top = \\ & = D_0^{-1}C^+(t)[-Q^\top(t) + Q^+(t)]\mathcal{H}_{pp}(t)(C^{-1}(t))^\top = -2iC^{-1}(t)\mathcal{H}_{pp}(t)(C^{-1}(t))^\top, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

**Свойство 10.15.** Если матрица  $D_0$  (10.7) положительно определена, то справедливо соотношение

$$2iB^{-1}(t)\mathcal{H}_{xx}(t)(B^{-1}(t))^\top = \frac{d}{dt}[D_0^{-1}B^+(t)(B^\top(t))^{-1}]. \quad (10.31)$$

**Доказательство.** Действительно, из (10.16) следует

$$\begin{aligned} & B^{-1}(t)\mathcal{H}_{xx}(t)(B^{-1}(t))^\top = \frac{i}{2}D_0^{-1}B^+(t)[Q^{-1}(t) - (Q^*(t))^{-1}]\mathcal{H}_{xx}(t)(B^{-1}(t))^\top = \\ & = \frac{i}{2}D_0^{-1}[B^{-1}(t)(\mathcal{H}_{xx}(t)C(t)B^{-1}(t) - \mathcal{H}_{xx}(t)C^+(t)(B^{-1}(t))^* + \\ & + \mathcal{H}_{px}(t)B(t)B^{-1}(t) - \mathcal{H}_{px}(t)B^*(t)(B^{-1}(t))^*) (2i \operatorname{Im} Q^{-1}(t))B^*(t)D_0^{-1}]^\top = \\ & = \frac{i}{2}D_0^{-1}[B^{-1}(t)\dot{B}(t)B^{-1}(t)B^*(t) - B^{-1}(t)\dot{B}^*(t)]^\top = \frac{i}{2}D_0^{-1}\left[\frac{d}{dt}B^{-1}(t)B^*(t)\right]^\top, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

**Свойство 10.16.** Если существует общее решение системы Гамильтона (9.6), непрерывно зависящее от начальных данных  $z_0 = (\vec{p}_0, \vec{x}_0)$ , такое, что матрица

$$S(t) = \left\| \frac{\partial z(t, z_0)}{\partial z_0} \right\|_{2n \times 2n}, \quad t \in [0, T] \quad (10.32)$$

невырождена ( $\det S(t) \neq 0$ ), то общее решение системы в вариациях (9.7) можно представить в виде

$$A(t) = S(t)A(0) \quad (10.33)$$

или

$$\begin{aligned} B(t) &= \left\| \frac{\partial p_k(t, z_0)}{\partial p_{0j}} \right\|_{n \times n} B(0) + \left\| \frac{\partial p_k(t, z_0)}{\partial x_{0j}} \right\|_{n \times n} C(0) = \lambda_4^\top(t)B(0) - \lambda_2^\top(t)C(0), \\ C(t) &= \left\| \frac{\partial x_k(t, z_0)}{\partial p_{0j}} \right\|_{n \times n} B(0) + \left\| \frac{\partial x_k(t, z_0)}{\partial x_{0j}} \right\|_{n \times n} C(0) = -\lambda_3^\top(t)B(0) + \lambda_1^\top(t)C(0), \end{aligned} \quad (10.34)$$

где обозначено  $\lambda_k(t) = \lambda_k(t, s)|_{s=0}$  –  $n \times n$  матричные блоки матрицанта  $U(t) = U(t, s)|_{s=0}$  системы в вариациях

$$\dot{U} = J\mathcal{H}_{zz}(t)U, \quad U|_{t=s} = \mathbb{I}_{2n \times 2n}; \quad (10.35)$$

$$U(t, s) = \begin{pmatrix} \lambda_4^T(t, s) & -\lambda_2^T(t, s) \\ -\lambda_3^T(t, s) & \lambda_1^T(t, s) \end{pmatrix} \quad (10.36)$$

и  $S(t) = U(t)$ , т.е. справедливо

$$\lambda_1^T(t) = \left\| \frac{\partial X_k(t, z_0)}{\partial x_{0j}} \right\|_{n \times n}, \quad \lambda_3^T(t) = - \left\| \frac{\partial X_k(t, z_0)}{\partial p_{0j}} \right\|_{n \times n}; \quad (10.37)$$

$$\lambda_2^T(t) = - \left\| \frac{\partial P_k(t, z_0)}{\partial x_{0j}} \right\|_{n \times n}, \quad \lambda_4^T(t) = \left\| \frac{\partial P_k(t, z_0)}{\partial p_{0j}} \right\|_{n \times n}. \quad (10.38)$$

**Доказательство.** Продифференцируем систему Гамильтона (9.6) по  $z_{0k}$  и получим, что  $a_k = \partial z(t, z_0)/\partial z_{0k}$  есть решение системы (9.7) с начальным условием  $a_k(0) = (\delta_{1,k}, \dots, \delta_{2n,k})$ . Следовательно,  $S(t)$  (10.32) – фундаментальная матрица системы (9.7).

**Пример 10.2.** С помощью соотношений (10.33), (10.34) найти решение системы в вариациях (9.6), отвечающей гамильтониану

$$\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{x}, t) = \frac{\vec{p}^2}{2m} - e\langle \vec{E}, \vec{x} \rangle, \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^3, \quad (10.39)$$

и начальному условию

$$C(0) = \mathbb{I}_{3 \times 3}, \quad B(0) = \text{diag}(b_1, b_2, b_3), \quad \text{Im } b_k > 0. \quad (10.40)$$

Здесь  $\vec{E}$  – напряженность электрического поля, а  $e$  – заряд частицы.

**Решение.** Общее решение системы Гамильтона с гамильтонианом (10.39) имеет вид (см. пример 10.6 [5])

$$\begin{aligned} \vec{X}(t, z_0) &= \frac{e}{2m} \vec{E} t^2 + \frac{\vec{p}_0}{m} t + \vec{x}_0, \\ \vec{P}(t, z_0) &= e \vec{E} t + \vec{p}_0. \end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned} \left\| \frac{\partial P_k(t, z_0)}{\partial p_{0j}} \right\| &= \mathbb{I}_{3 \times 3}, & \left\| \frac{\partial P_k(t, z_0)}{\partial x_{0j}} \right\| &= 0_{3 \times 3}, \\ \left\| \frac{\partial X_k(t, z_0)}{\partial p_{0j}} \right\| &= \frac{t}{m} \mathbb{I}_{3 \times 3}, & \left\| \frac{\partial X_k(t, z_0)}{\partial x_{0j}} \right\| &= \mathbb{I}_{3 \times 3}. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$B(t) = B(0); \quad C(t) = \frac{t}{m} B(0) + C(0). \quad (10.41)$$

**Пример 10.3.** С помощью соотношений (10.33), (10.34) найти решение системы в вариациях (9.6), отвечающей гамильтониану

$$\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{x}, t) = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{\mathcal{A}} \right)^2, \quad \vec{\mathcal{A}} = \left( -\frac{Hx_2}{2}, \frac{Hx_1}{2}, 0 \right), \quad H = \text{const} \quad (10.42)$$

и начальным условиям  $\vec{x}|_{t=0} = \vec{x}_0, \vec{p}|_{t=0} = \vec{p}_0$ . Здесь  $H$  – напряженность магнитного поля,  $c$  – скорость света, а  $e$  – заряд частицы.

**Решение.** Общее решение системы Гамильтона имеет вид (см. пример 10.7 [5])

$$\vec{X}(t, z_0) = U_1 \vec{x}_0 + U_2 \vec{p}_0, \quad \vec{P}(t, z_0) = U_1 \vec{p}_0 + U_3 \vec{x}_0,$$

где матрицы

$$U_1 = \frac{1}{2}[1 + e^{-i\omega\sigma_2 t}], \quad U_2 = \frac{i}{2}\sigma_2[1 - e^{-i\omega\sigma_2 t}], \quad (10.43)$$

$$U_3 = \frac{i m \omega}{2}[1 - e^{-i\omega\sigma_2 t}],$$

где  $\sigma_k$  – матрицы Паули. Следовательно, из (10.34) получим

$$B(t) = U_1 B(0) + U_3 C(0), \quad C(t) = U_1 C(0) + U_2 B(0).$$

**Свойство 10.17.** Если для системы в вариациях (9.7) поставить задачу Коши

$$\tilde{B}(t)|_{t=s} = B_0, \quad \tilde{C}(t)|_{t=s} = 0, \quad B_0^\top = B_0, \quad (10.44)$$

то справедливо соотношение

$$\int_s^t \tilde{B}^{-1}(\tau) \mathcal{H}_{xx}(t) (\tilde{B}^{-1}(\tau))^\top d\tau = (B_0^{-1})^\top \lambda_2(t, s) \lambda_4^{-1}(t, s) (B_0^{-1})^\top, \quad (10.45)$$

где  $\lambda_2(t)$ ,  $\lambda_4(t)$  определены в (10.38).

**Доказательство.** Из (10.44) следует, что  $D_0 = 0$  и формулу (10.31) нельзя использовать. Поэтому рассмотрим вспомогательную задачу Коши

$$B(t, \epsilon)|_{t=s} = B_0, \quad C(t, \epsilon)|_{t=s} = \epsilon \mathbb{I}, \quad \mathbb{I} = \|\delta_{kj}\|_{n \times n}. \quad (10.46)$$

Очевидно, что

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} B(t, \epsilon) = \tilde{B}(t), \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} C(t, \epsilon) = \tilde{C}(t)$$

и

$$D_0(\epsilon) = \frac{\epsilon}{2i}(B_0 - B_0^*).$$

Будем полагать, что матрица  $D_0(\epsilon)$  симметрична и положительно определена при  $\epsilon \neq 0$ . Следовательно, можно воспользоваться соотношением (10.31). Получим

$$\int_s^t B^{-1}(\tau, \epsilon) \mathcal{H}_{xx}(\tau) (B^{-1}(\tau, \epsilon))^\top d\tau = -\frac{1}{\epsilon} (B_0 - B_0^*)^{-1} B^+(\tau, \epsilon) (B^{-1}(\tau, \epsilon))^\top|_s^t. \quad (10.47)$$

В силу (10.34)

$$B(t, \epsilon) = \lambda_4^\top(t, s) B_0 - \epsilon \lambda_2^\top(t, s).$$

Следовательно,

$$B^{-1}(t, \epsilon) = (1 + \epsilon B_0^{-1} (\lambda_4^{-1}(t, s))^\top \lambda_2^\top(t, s)) B_0^{-1} (\lambda_4^{-1}(t, s))^\top + O(\epsilon^2).$$

Тогда

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} B^+(\tau, \epsilon) (B^{-1}(t, \epsilon))^\top|_s^t &= \left[ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [B^{-1}(t, \epsilon) B^*(t, \epsilon) - B_0^{-1} B_0^*] \right]^\top = \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ B_0^{-1} B_0^* - \epsilon B_0^{-1} (\lambda_4^{-1}(t, s))^\top \lambda_2^\top(t, s) (1 - B_0^{-1} B_0^*) - B_0^{-1} B_0^* + O(\epsilon^2) \right\}^\top = \\ &= -(B_0 - B_0^*) (B_0^{-1})^\top \lambda_2(t, s) \lambda_4^{-1}(t, s) (B_0^{-1})^\top. \end{aligned}$$

Подставим полученное выражение в (10.47) и получим (10.45).

## 11. Квазиклассические траекторно-когерентные состояния

Для построения асимптотических решений уравнения Шрёдингера (8.2) нам потребуются свойства решений и операторов симметрии (9.4) квадратичного уравнения Шрёдингера (9.3).

**Свойство 11.1.** Пусть  $a_1(t)$ ,  $a_2(t)$  — два решения системы в вариациях, а  $\hat{a}_1(t)$ ,  $\hat{a}_2(t)$  — отвечающие им операторы (9.4). Тогда справедливо соотношение

$$[\hat{a}_1(t), \hat{a}_2(t)] = i\hbar N_1 N_2 \{a_1(t), a_2(t)\} = i\hbar N_1 N_2 \{a_1(0), a_2(0)\}. \quad (11.1)$$

**Доказательство.** Действительно,

$$\begin{aligned} [\hat{a}_1(t), \hat{a}_2(t)] &= N_1 N_2 [\langle a_1(t), J\Delta\hat{z} \rangle, \langle a_2(t), J\Delta\hat{z} \rangle] = i\hbar N_1 N_2 \langle J a_1(t), J J a_2(t) \rangle = \\ &= i\hbar N_1 N_2 \langle a_1(t), J^\top J J a_2(t) \rangle = i\hbar N_1 N_2 \langle a_1(t), J a_2(t) \rangle = i\hbar N_1 N_2 \{a_1(t), a_2(t)\}, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать. Здесь мы воспользовались правилами коммутации операторов  $\Delta\hat{z}$ .

◇ Всюду в дальнейшем, если не оговорено противное, будем предполагать, что начальные условия для системы в вариациях удовлетворяют соотношениям (10.9), (10.10):

$$\begin{aligned} \{a_j(0), a_k(0)\} &= \{a_j^*(0), a_k^*(0)\} = 0, \\ \{a_j(0), a_k^*(0)\} &= i d_k \delta_{kj}, \\ d_k &> 0, \quad k, j = \overline{1, n}, \end{aligned} \quad (11.2)$$

а нормировочная постоянная

$$N_k = \frac{1}{\sqrt{\hbar d_k}}.$$

Тогда из (11.1) для операторов (9.8) следуют коммутационные соотношения

$$[\hat{a}_k(t), \hat{a}_j(t)] = [\hat{a}_k^+(t), \hat{a}_j^+(t)], \quad [\hat{a}_k(t), \hat{a}_j^+(t)] = \delta_{kj}. \quad (11.3)$$

В этом случае операторы (9.8) примут вид

$$\hat{a}_k(t) = \frac{1}{\sqrt{\hbar d_k}} \langle a_k(t), J\Delta\hat{z} \rangle. \quad (11.4)$$

◇ Операторы  $\hat{a}_j(t)$  и  $\hat{a}_j^+(t)$ , определенные посредством (11.3), образуют полный набор операторов симметрии уравнения (9.10).

◇ С учетом результатов раздела «Система в вариациях» функцию  $\Psi_0^{(0)}(\vec{x}, t)$  (9.9) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \Psi_0^{(0)}(\vec{x}, t) &= |0, t\rangle = \frac{N_\hbar}{\sqrt{\det C(t)}} \times \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \int_0^t [\langle \vec{P}(t), \dot{\vec{X}}(t) \rangle - \mathcal{H}(t)] dt + \langle \vec{P}(t), \Delta\vec{x} \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta\vec{x}, Q(t) \Delta\vec{x} \rangle \right] \right\}, \end{aligned} \quad (11.5)$$

где  $N_\hbar = [(\pi\hbar)^{-n} \det D_0]^{1/4}$ . Причем, если  $D_0$  положительно определена и диагональна ( $D_0 = \|d_k \delta_{kj}\|$  и  $d_k > 0$ ), то матрица  $C(t)$  невырождена, т.е.  $\det C(t) \neq 0$ , и матрица  $\text{Im } Q(t)$  положительно определена.

Определим теперь набор функций  $|\nu, t\rangle$  как результат действия операторов «рождения»  $\hat{a}_j^+(t)$  на состояние  $|0, t\rangle$  (11.5):

$$|\nu, t\rangle = \frac{1}{\sqrt{\nu!}} [\hat{a}^+(t)]^\nu |0, t\rangle = \prod_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{\nu_j!}} [\hat{a}_j^+(t)]^{\nu_j} |0, t\rangle, \quad (11.6)$$

$$\nu = (\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_n) \in \mathbb{Z}_+^n, \quad \hat{a}^+(t) = (\hat{a}_1^+(t), \dots, \hat{a}_n^+(t)).$$

◆ Состояния (11.6) называются *квазиклассическими траекторно-когерентными состояниями* (ТКС).

**Свойство 11.2.** Функция  $|0, t\rangle$  (11.5) является «вакуумным» состоянием операторов  $\hat{a}_j(t)$ :

$$\hat{a}_j(t)|0, t\rangle = 0, \quad j = \overline{1, n}. \quad (11.7)$$

**Доказательство.** Действительно, если мы подставим (11.5) и (11.4) в (11.7), то получим

$$|0, t\rangle [\langle \vec{Z}_j(t), Q(t)\Delta\vec{x} \rangle - \langle \vec{W}_j(t), \Delta\vec{x} \rangle] = 0,$$

поскольку

$$Q(t)\vec{Z}_j(t) = B(t)C^{-1}(t)\vec{Z}_j(t) = \vec{W}_j(t).$$

**Свойство 11.3.** Справедливы соотношения

$$\begin{aligned} \hat{a}_k(t)|\nu, t\rangle &= \sqrt{\nu_k} |\tilde{\nu}_k^{(-)}, t\rangle, \\ \hat{a}_k^+(t)|\nu, t\rangle &= \sqrt{\nu_k + 1} |\tilde{\nu}_k^{(+)}, t\rangle, \end{aligned} \quad (11.8)$$

$$\tilde{\nu}_k^{(\pm)} = (\nu_1 \pm \delta_{1k}, \nu_2 \pm \delta_{2k}, \dots, \nu_n \pm \delta_{nk}).$$

**Доказательство.** Действительно,

$$[\hat{a}_j(t), \{\hat{a}_k^+(t)\}^{\nu_k}] = \nu_k \{\hat{a}_k^+(t)\}^{\nu_k - 1} \delta_{jk}.$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \hat{a}_j(t)|\nu, t\rangle &= \prod_{k=1}^n \frac{1}{\sqrt{\nu_k!}} [\hat{a}_j(t), \{\hat{a}_k^+(t)\}^{\nu_k}] |0, t\rangle = \prod_{k=1}^n \frac{\nu_j}{\sqrt{\nu_k!}} \{\hat{a}_k^+(t)\}^{\nu_k - \delta_{kj}} |0, t\rangle = \\ &= \sqrt{\nu_j} \prod_{k=1}^n \frac{1}{\sqrt{(\nu_k - \delta_{kj})!}} \{\hat{a}_k^+(t)\}^{\nu_k - \delta_{kj}} |0, t\rangle = \sqrt{\nu_j} |\tilde{\nu}_k^{(-)}, t\rangle; \\ \hat{a}_j^+(t)|\nu, t\rangle &= \prod_{k=1}^n \frac{1}{\sqrt{\nu_k!}} \{\hat{a}_k^+(t)\}^{\nu_k + \delta_{kj}} |0, t\rangle = \\ &= \prod_{k=1}^n \frac{\sqrt{\nu_j + 1}}{\sqrt{(\nu_k + \delta_{kj})!}} \{\hat{a}_k^+(t)\}^{\nu_k + \delta_{kj}} |0, t\rangle = \sqrt{\nu_j + 1} |\tilde{\nu}_k^{(+)}, t\rangle, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

**Свойство 11.4.** Построенные квазиклассические ТКС  $|\nu, t\rangle$  образуют при каждом  $t \in \mathbb{R}$ ,  $z_0 \in \mathbb{R}_{p,x}^{2n}$  ортонормированную систему функций

$$\langle t, \nu' | \nu, t \rangle = \delta_{\nu\nu'}, \quad \nu, \nu' \in \mathbb{Z}_+^n. \quad (11.9)$$

Здесь

$$\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \varphi_1^*(\vec{x}) \varphi_2(\vec{x}) d\vec{x}.$$

**Доказательство.** Рассмотрим выражение

$$\langle \nu', t | \nu, t \rangle = \frac{1}{\sqrt{\nu'! \nu!}} \langle 0, t | \hat{a}^{\nu'}(t) \{ \hat{a}^+(t) \}^\nu | 0, t \rangle.$$

Прокоммутировав операторы «рождения» и «уничтожения» с учетом коммутационных соотношений (11.3), соотношений (11.7) и эквивалентных им  $\langle t, 0 | \hat{a}_j^+ \rangle = 0$ , получим

$$\langle t, \nu' | \nu, t \rangle = \langle t, 0 | 0, t \rangle \delta_{\nu, \nu'}. \quad (11.10)$$

Вычислим

$$\langle t, 0 | 0, t \rangle = \frac{N_h^2}{|\det C(t)|} \int_{\mathbb{R}^n} \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} S(\vec{x}, t)\right] d\vec{x}. \quad (11.11)$$

В силу (10.16) и (11.5)

$$\operatorname{Im} S(\vec{x}, t) = \frac{1}{2} \langle \Delta \vec{x}, \operatorname{Im} Q(t) \Delta \vec{x} \rangle.$$

Матрица  $\operatorname{Im} Q(t)$  вещественна и положительно определена (см. разд. «Свойства решений системы в вариациях»). Следовательно, существует матрица  $\sqrt{\operatorname{Im} Q(t)}$ , причем

$$\det \sqrt{\operatorname{Im} Q(t)} = \frac{\sqrt{\det D_0}}{|\det C(t)|}.$$

Сделаем в интеграле (11.11) замену

$$\vec{\xi} = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \sqrt{\operatorname{Im} Q(t)} \Delta \vec{x}$$

и получим

$$\langle t, 0 | 0, t \rangle = \frac{N_h^2}{\sqrt{\det D_0}} \hbar^{n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-\xi^2} d\vec{\xi} = \frac{(\pi \hbar)^{n/2} N_h^2}{\sqrt{\det D_0}} = 1,$$

так как  $\det D_0 = \prod_{k=1}^n d_k$ . Что и требовалось доказать. Вопрос полноты системы функций  $|\nu, t\rangle$  мы обсудим позднее.

**Свойство 11.5 (траекторной когерентности).** Справедливы соотношения

$$\begin{aligned} \langle t, \nu | \hat{x} | \nu, t \rangle &= \vec{X}(t, z_0), & \nu &\in \mathbb{Z}_+^n; \\ \langle t, \nu | \hat{p} | \nu, t \rangle &= \vec{P}(t, z_0), & \hat{p} &= -i\hbar \nabla, \quad \hat{x} = \vec{x}. \end{aligned} \quad (11.12)$$

**Доказательство.** Соотношения, обратные соотношениям (11.4), имеют вид

$$\begin{aligned} \Delta \vec{x} &= -i \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (C(t) D_0^{-1/2} \hat{a}^+ - C^*(t) D_0^{-1/2} \hat{a}), \\ \Delta \hat{p} &= -i \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (B(t) D_0^{-1/2} \hat{a}^+ - B^*(t) D_0^{-1/2} \hat{a}), \end{aligned} \quad (11.13)$$

что непосредственно следует из (11.4), (10.24) и (10.25).

Поскольку  $\vec{x} = \vec{x}(t) + \Delta \vec{x}$ , то в силу очевидных тождеств

$$\begin{aligned} \langle t, \nu | \vec{x}(t) | \nu, t \rangle &= \vec{x}(t), \\ \langle t, \nu | \hat{a}_k | \nu, t \rangle &= \langle t, \nu | \hat{a}_l^+ | \nu, t \rangle = 0, \quad k, l = \overline{1, n}, \end{aligned}$$

и соотношений (11.13) получим первое равенство в (11.12). Аналогично доказывается второе равенство.

**Следствие.** Для любого оператора  $\widehat{A}(T)$  с вейлевским символом

$$A(\vec{p}, \vec{x}, t, \hbar) = A(z, t, \hbar)$$

справедливо следующее соотношение:

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle \nu, t | \widehat{A}(t) | \nu, t \rangle = A(z(t), t, 0)$$

равно главному символу оператора  $\widehat{A}$ , вычисленному в точках классической траектории.

**Доказательство** следует из того, что квазиклассические траекторно-когерентные состояния являются квазиклассически сосредоточенными функциями  $(|\nu, t\rangle \in \mathcal{P}_\hbar^t)$ .

**Свойство 11.6.** Для матриц дисперсии координат  $\sigma_{xx}$  и импульсов  $\sigma_{pp}$  и матрицы корреляции координат и импульсов  $\sigma_{px}$ , вычисленных в квазиклассических ТК-состояниях  $|\nu, t\rangle$ , справедливы соотношения

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(t) &= \frac{\hbar}{4} [C(t)D_\nu^{-1}C^+(t) + C^*(t)D_\nu^{-1}C^\Gamma(t)], \\ \sigma_{pp}(t) &= \frac{\hbar}{4} [B(t)D_\nu^{-1}B^+(t) + B^*(t)D_\nu^{-1}B^\Gamma(t)], \\ \sigma_{px}(t) &= \frac{\hbar}{4} [B(t)D_\nu^{-1}C^+(t) + B^*(t)D_\nu^{-1}C^\Gamma(t)]. \end{aligned} \quad (11.14)$$

Здесь

$$\sigma_{AB} = \frac{1}{2} \langle (\widehat{A}\widehat{B} + \widehat{B}\widehat{A}) \rangle - \langle \widehat{A} \rangle \langle \widehat{B} \rangle, \quad \langle \widehat{A} \rangle = \bar{A},$$

а через  $D_\nu^{-1}$  обозначена матрица

$$D_\nu^{-1} = \left\| \frac{2\nu_j + 1}{\text{Im } b_j} \delta_{kj} \right\|_{n \times n}. \quad (11.15)$$

**Доказательство.** Из соотношений (11.8) следует

$$\begin{aligned} \langle t, \nu | \hat{a}_j(t) \hat{a}_k(t) | \nu, t \rangle &= \langle t, \nu | \hat{a}_j^+(t) \hat{a}_k^+(t) | \nu, t \rangle = 0, \\ \langle t, \nu | \hat{a}_j^+(t) \hat{a}_k(t) | \nu, t \rangle &= \nu_j \delta_{kj}, \\ \langle t, \nu | \hat{a}_k(t) \hat{a}_j^+(t) | \nu, t \rangle &= (\nu_j + 1) \delta_{kj}. \end{aligned} \quad (11.16)$$

С учетом (11.13) и (11.16) получим

$$\begin{aligned} \sigma_{p_j p_k} &= -\frac{\hbar}{4} \langle t, \nu | \left[ (\langle \vec{j}, B(t) D_0^{-1/2} \hat{a}^+(t) \rangle - \langle \vec{j}, B^*(t) D_0^{-1/2} \hat{a}(t) \rangle) \times \right. \\ &\quad \left. \times (\langle \vec{k}, B(t) D_0^{-1/2} \hat{a}^+(t) \rangle - \langle \vec{k}, B^*(t) D_0^{-1/2} \hat{a}(t) \rangle) \right]_+ | \nu, t \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{4} \langle \vec{j}, \left[ B(t) D_0^{-1/2} A_1 D_0^{-1/2} B^+(t) + B^*(t) D_0^{-1/2} A_2 D_0^{-1/2} B^\Gamma(t) + \right. \\ &\quad \left. + B(t) D_0^{-1/2} A_2 D_0^{-1/2} B^+(t) + B^*(t) D_0^{-1/2} A_1 D_0^{-1/2} B^\Gamma(t) \right] \vec{k} \rangle, \end{aligned}$$

где обозначено

$$A_1 = \|\nu_j \delta_{kj}\|_{n \times n}, \quad A_2 = \|(\nu_j + 1) \delta_{kj}\|_{n \times n},$$

$$\vec{k} = (\delta_{1k}, \delta_{2k}, \dots, \delta_{nk}), \quad k, j = \overline{1, n}.$$

Поскольку

$$D_0^{-1/2}(A_1 + A_2)D_0^{-1/2} = D_\nu^{-1},$$

соотношение для  $\sigma_{pp}$  доказано. Аналогично доказываются остальные соотношения в (11.14).

**Свойство 11.7.** Пусть

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \mathcal{H}(t) + \langle \mathcal{H}_z(t), \Delta \hat{z} \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta \hat{z}, \mathcal{H}_{zz}(t) \Delta \hat{z} \rangle, \quad (11.17)$$

где  $\Delta \hat{z} = (\Delta \hat{p}, \Delta \hat{x})$ ;  $\hat{z} = (\hat{p}, \hat{x})$ ;  $Z(t) = (\vec{P}(t), \vec{X}(t))$ ;  $\mathcal{H}_z(t) = \partial_z \mathcal{H}(z, t)|_{z=Z(t)}$ , а  $\mathcal{H}_{zz}(t) = \left| \frac{\partial^2 \mathcal{H}(z, t)}{\partial z_j \partial z_k} \right|_{2n \times 2n} \Big|_{z=Z(t)}$ .

Тогда функции  $|\nu, t\rangle$  являются точными решениями уравнения Шрёдингера с гамильтонианом (11.17):

$$\{-i\hbar \partial_t + \hat{\mathcal{H}}_0\} |\nu, t\rangle \equiv 0. \quad (11.18)$$

**Доказательство.** По определению,

$$\begin{aligned} [(-i\hbar \partial_t + \hat{\mathcal{H}}_0), \hat{a}_k^+(t)] &= [(-i\hbar \partial_t + \hat{\mathcal{H}}_0), \hat{a}_k(t)] = 0, \\ \{-i\hbar \partial_t + \hat{\mathcal{H}}_0\} |0, t\rangle &= 0, \quad k = \overline{1, n}. \end{aligned} \quad (11.19)$$

Тогда из (11.19) и (11.6) следует (11.18).

**Свойство 11.8.** Для «вакуумного» состояния ( $\nu = 0$ ) справедливо соотношение

$$\text{rang} \left( \Delta_2(t) - \frac{i\hbar}{2} J \right) \Big|_{\nu=0} = n, \quad (11.20)$$

где  $J$  – единичная симплектическая матрица, а

$$\Delta_2(t) = \begin{pmatrix} \sigma_{pp}(t) & \sigma_{px}(t) \\ \sigma_{xp}(t) & \sigma_{xx}(t) \end{pmatrix}.$$

**Доказательство.** Из (11.14) следует, что

$$\Delta_2(t) = \frac{\hbar}{4} A(t) \bar{D}_\nu^{-1} A^+(t), \quad (11.21)$$

где

$$A(t) = \begin{pmatrix} B(t) & B^*(t) \\ C(t) & C^*(t) \end{pmatrix}, \quad \bar{D}_\nu^{-1} = \begin{pmatrix} D_\nu^{-1} & 0 \\ 0 & D_\nu^{-1} \end{pmatrix}.$$

Из соотношений (10.7), (10.8) и (10.9) следует, что

$$A^+(t) J A(t) = 2i\rho_3 \bar{D}_0, \quad \rho_3 = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix}. \quad (11.22)$$

Ранг матрицы не изменится при умножении ее на невырожденную матрицу. Поскольку  $\det(JA(t)\bar{D}_0^{-1/2}) \neq 0$ , то

$$\text{rang} \left( \Delta_2(t) - \frac{i\hbar}{2} J \right) = \text{rang} \left[ -\frac{\hbar}{2} \bar{D}_0^{-1/2} A^+(t) J \left( \frac{1}{2} A(t) \bar{D}_\nu^{-1} A^+(t) - iJ \right) J A(t) \bar{D}_0^{-1/2} \right] =$$



$$\begin{aligned}
&= \text{rang} \left[ \frac{\hbar}{2} \bar{D}_0^{-1/2} (\bar{D}_0 \bar{D}_\nu^{-1} \bar{D}_0 + \rho_3 \bar{D}_0) \bar{D}_0^{-1/2} \right] = \text{rang} \left[ \frac{\hbar}{2} (\bar{D}_0 \bar{D}_\nu^{-1} + \rho_3) \right] = \\
&= \text{rang} \left[ \hbar \text{diag}((\nu_1 + 1), (\nu_2 + 1), \dots, (\nu_n + 1), \nu_1, \nu_2, \dots, \nu_n) \right].
\end{aligned}$$

Следовательно, (11.20) справедливо.

◇ Из свойства 11.8 следует, что при  $n = 1$  вакуумное состояние  $|0, t\rangle$  минимизирует соотношение неопределенностей Шрёдингера

$$\sigma_{pp}\sigma_{xx} - \sigma_{px}^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (11.23)$$

Так, в одномерном случае из (11.20) при  $n = 1$  следует

$$\det \begin{pmatrix} \sigma_{pp} & \sigma_{px} + \frac{i\hbar}{2} \\ \sigma_{xp} - \frac{i\hbar}{2} & \sigma_{xx} \end{pmatrix} = \sigma_{pp}\sigma_{xx} - \frac{\hbar^2}{4} - \sigma_{px}^2 = 0,$$

что и означает минимизацию соотношения (11.23). Здесь мы воспользовались тем, что  $\sigma_{xp} = \sigma_{px}$ . Таким образом, соотношение неопределенностей Шрёдингера минимизируется на вакуумных траекторно-когерентных состояниях.

◇ Соотношение (11.20) является многомерным аналогом принципа неопределенностей.

◇ Соотношение (11.4) может быть представлено в виде

$$\begin{aligned}
\hat{a}(t) &= \frac{1}{\sqrt{\hbar}} T(t) \Delta \hat{z}, \quad \hat{a}(t) = (\hat{a}(t), \hat{a}^+(t)), \quad \Delta \hat{z} = (\Delta \hat{p}, \Delta \hat{x}), \\
T(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} D_0^{-1/2} C^\Gamma(t) & D_0^{-1/2} B^\Gamma(t) \\ D_0^{-1/2} C^+(t) & D_0^{-1/2} B^+(t) \end{pmatrix}.
\end{aligned} \quad (11.24)$$

Тогда нетрудно показать (см. разд. «Система в вариациях», свойство 10.11), что операторы  $\Delta \hat{x}_j$ ,  $\Delta \hat{p}_j$  и операторы  $\hat{a}_j^*(t)$ ,  $\hat{a}_j(t)$  связаны линейным каноническим преобразованием  $\tilde{T}$ , матрица которого  $\tilde{T}$  имеет форму

$$\begin{aligned}
\Delta \hat{z} &= \sqrt{\hbar} \tilde{T}(t) \hat{a}, \\
\tilde{T}(t) = T^{-1}(t) &= \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} B^*(t) (D_0^{-1/2})^* & -B(t) D_0^{-1/2} \\ -C^*(t) D_0^{-1/2} & +C(t) D_0^{-1/2} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \quad (11.25)$$

Последнее соотношение позволяет каждой функции на фазовом пространстве сопоставить оператор, действующий в  $\mathcal{P}_\hbar^t$  по правилу

$$A(\vec{p}, \vec{x}, t) = A(z, t) \rightarrow \hat{A} = A(z(t) + \sqrt{\hbar} \tilde{T} \hat{a}(t), t), \quad (11.26)$$

где задан порядок действия некоммутирующих операторов  $\hat{a}_k(t)$ ,  $\hat{a}_k^+(t)$ ,  $k = \overline{1, n}$ .

◇ Если для системы в вариациях поставить начальные условия (10.11), тогда

$$\begin{aligned}
|\nu, 0\rangle &= N_\hbar \exp \left[ \langle \vec{p}_0, (\vec{x} - \vec{x}_0) \rangle + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n b_j (x_j - x_{j0})^2 \right] \times \\
&\times \prod_{k=1}^n \frac{1}{\sqrt{\nu_k!}} \left( -\frac{i}{\sqrt{2}} \right)^{\nu_k} H_{\nu_k} \left( \sqrt{\frac{\text{Im } b_k}{\hbar}} (x_k - x_{k0}) \right),
\end{aligned} \quad (11.27)$$

где  $H_{\nu_k}(\xi)$  — полиномы Эрмита.

## 12. Производящая функция для квазиклассических ТКС

Определим состояние  $|\vec{\alpha}, t\rangle$  при помощи соотношения

$$|\vec{\alpha}, t\rangle = \widehat{\mathcal{D}}(\vec{\alpha})|0, t\rangle, \quad (12.1)$$

где  $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$  – комплексный вектор, а  $\widehat{\mathcal{D}}(\vec{\alpha})$  – оператор сдвига, который в силу (11.3) можно представить в виде

$$\widehat{\mathcal{D}}(\vec{\alpha}) = \exp(\langle \vec{\alpha}, \hat{a}^+(t) \rangle - \langle \vec{\alpha}^*, \hat{a}(t) \rangle). \quad (12.2)$$

Операторы  $\hat{a}_k(t)$ ,  $\hat{a}_j^+(t)$  были определены в (11.4). Из определения функций  $|\vec{\alpha}, t\rangle$  непосредственно следует

**Свойство 12.1.** Оператор сдвига  $\widehat{\mathcal{D}}(\vec{\alpha})$  можно представить в виде

$$\widehat{\mathcal{D}}(\vec{\alpha}) = \exp\left(-\frac{1}{2}|\vec{\alpha}|^2\right) \exp(\langle \vec{\alpha}, \hat{a}^+(t) \rangle) \exp(-\langle \vec{\alpha}^*, \hat{a}(t) \rangle). \quad (12.3)$$

**Доказательство.** Воспользуемся тождеством Вейля

$$e^{\widehat{A}+\widehat{B}} = e^{-[\widehat{A}, \widehat{B}]/2} e^{\widehat{A}} e^{\widehat{B}}, \quad (12.4)$$

которое справедливо для любых самосопряженных операторов, удовлетворяющих условию

$$[\widehat{A}, \widehat{C}] = [\widehat{B}, \widehat{C}] = 0, \quad \text{где } \widehat{C} = [\widehat{A}, \widehat{B}]. \quad (12.5)$$

Положим в тождестве (12.4)

$$\widehat{A} = \langle \vec{\alpha}, \hat{a}^+(t) \rangle, \quad \widehat{B} = -\langle \vec{\alpha}^*, \hat{a}(t) \rangle.$$

Операторы «рождения» и «уничтожения» удовлетворяют коммутационным соотношениям (11.4):

$$[\hat{a}_j, \hat{a}_k] = [\hat{a}_j, \hat{a}_k] = 0, \quad [\hat{a}_j(t), \hat{a}_k^+(t)] = \delta_{jk}, \quad k, j = \overline{1, n},$$

и, следовательно, операторы  $\widehat{A}$ ,  $\widehat{B}$  удовлетворяют условиям (12.5), причем  $[\widehat{A}, \widehat{B}] = |\vec{\alpha}|^2$ . В результате приходим к (12.3).

**Свойство 12.2.** Состояние  $|\vec{\alpha}, t\rangle$  (12.1) является собственным состоянием операторов «уничтожения»  $\hat{a}_j(t)$  с собственным значением  $\alpha_j$ :

$$\hat{a}_j|\vec{\alpha}, t\rangle = \alpha_j|\vec{\alpha}, t\rangle, \quad j = \overline{1, n}. \quad (12.6)$$

**Доказательство.** Функция  $|0, t\rangle$  является вакуумным состоянием (11.7) для операторов  $\hat{a}_j(t)$ :

$$\hat{a}_j(t)|0, t\rangle = 0, \quad j = \overline{1, n},$$

поэтому

$$e^{-\langle \vec{\alpha}^*, \hat{a}(t) \rangle}|0, t\rangle = |0, t\rangle.$$

Тогда  $|\vec{\alpha}, t\rangle$  можно представить в виде

$$|\vec{\alpha}, t\rangle = e^{-|\vec{\alpha}|^2/2} e^{\langle \vec{\alpha}, \hat{a}^+(t) \rangle}|0, t\rangle. \quad (12.7)$$

Разложим операторную экспоненту в ряд Тейлора и прокоммутируем операторы «рождения»  $\hat{a}_k^+(t)$  с оператором «уничтожения»  $\hat{a}_j(t)$ . С учетом соотношения

$$[\hat{a}_j(t), \{\hat{a}_k^+(t)\}^{\nu_k}] = \nu_k \{\hat{a}_k^+(t)\}^{\nu_k-1} \delta_{kj}$$

получим (12.6).

**Свойство 12.3.** Функция  $|\vec{\alpha}, t\rangle$  является производящей для квазиклассических ТКС  $|\nu, t\rangle$ .

**Доказательство.** Воспользуемся соотношением (12.7) и разложим правую его часть в ряд Тейлора по переменной  $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_2)$ :

$$|\vec{\alpha}, t\rangle = e^{-|\vec{\alpha}|^2/2} \sum_{|\nu|=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} \vec{\alpha}^\nu \{\hat{a}^+(t)\}^\nu |0, t\rangle = e^{-|\vec{\alpha}|^2/2} \sum_{|\nu|=0}^{\infty} \prod_{j=1}^n \frac{\alpha_j^{\nu_j}}{\nu_j!} \{\hat{a}_j^+(t)\}^{\nu_j} |0, t\rangle. \quad (12.8)$$

С учетом определения квазиклассических ТКС

$$|\nu, t\rangle = \prod_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{\nu_j!}} \{\hat{a}_j^+(t)\}^{\nu_j} |0, t\rangle$$

соотношение (12.8) можно записать в виде

$$|\vec{\alpha}, t\rangle = e^{-|\vec{\alpha}|^2/2} \sum_{|\nu|=0}^{\infty} \frac{\vec{\alpha}^\nu}{\sqrt{\nu_j!}} |\nu, t\rangle, \quad (12.9)$$

что и требовалось показать.

**Свойство 12.4.** Для функций  $|\vec{\alpha}, t\rangle$  (12.2) справедливо условие ортогональности

$$\langle \vec{\beta}, t | \vec{\alpha}, t \rangle = \exp\left\{-\frac{|\vec{\alpha}|^2}{2} - \frac{|\vec{\beta}|^2}{2} + \langle \vec{\alpha}, \vec{\beta}^* \rangle\right\}. \quad (12.10)$$

**Доказательство.** В левую часть соотношения (12.10) подставим разложение (12.9) и воспользуемся условием ортогональности (11.9) квазиклассических ТКС:

$$\begin{aligned} \langle \vec{\beta}, t | \vec{\alpha}, t \rangle &= \sum_{|\nu|=0}^{\infty} \sum_{|\mu|=0}^{\infty} e^{-|\vec{\beta}|^2/2} e^{-|\vec{\alpha}|^2/2} \frac{\vec{\alpha}^\nu (\vec{\beta}^*)^\mu}{\sqrt{\mu! \nu!}} \langle \mu, t | \nu \rangle = \\ &= e^{-|\vec{\alpha}|^2/2} e^{-|\vec{\beta}|^2/2} \sum_{|\nu|=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} \vec{\alpha}^\nu (\vec{\beta}^*)^\nu = \exp\left\{-\frac{|\vec{\alpha}|^2}{2} - \frac{|\vec{\beta}|^2}{2} + \langle \vec{\alpha}, \vec{\beta}^* \rangle\right\}. \end{aligned}$$

Таким образом, соотношение (12.10) доказано.

**Свойство 12.5.** Производящая функция  $|\vec{\alpha}, t\rangle$  является точным решением уравнения Шрёдингера с квадратичным гамильтонианом

$$\{-i\hbar\partial_t + \hat{\mathcal{H}}_0\} |\vec{\alpha}, t\rangle = 0. \quad (12.11)$$

Оператор  $\hat{\mathcal{H}}_0$  был определен в (11.17).

**Доказательство.** Операторы «рождения»  $\hat{a}(t)$  и «уничтожения»  $\hat{a}^+(t)$  — операторы симметрии уравнения Шрёдингера (12.11):

$$[(-i\hbar\partial_t + \hat{\mathcal{H}}_0(t)), \hat{a}_j(t)] = [(-i\hbar\partial_t + \hat{\mathcal{H}}_0(t)), \hat{a}_k(t)] = 0.$$

Следовательно, оператор  $\hat{\mathcal{D}}(\alpha)$  (12.3) также является оператором симметрии этого уравнения Шрёдингера:

$$[(-i\hbar\partial_t + \hat{\mathcal{H}}_0(t)), \hat{\mathcal{D}}(\alpha)] = 0.$$

Так как функция  $|0, t\rangle$  есть точное решение уравнения (12.11), то функция  $|\vec{\alpha}, t\rangle$  также есть точное решение этого уравнения, что и требовалось доказать.

**Свойство 12.6.** Производящая функция  $|\vec{\alpha}, t\rangle$  представляет собой гауссов волновой пакет следующего типа:

$$|\vec{\alpha}, t\rangle = |0, t\rangle \exp\left\{-\frac{|\vec{\alpha}|^2}{2} + i\sqrt{\frac{2}{\hbar}}\langle\Delta\vec{x}, (C^{-1}(t))^\top D_0^{1/2}\vec{\alpha}\rangle + \frac{1}{2}\langle\vec{\alpha}, D_0^{-1/2}(C^+(t))(C^{-1}(t))^\top D_0^{1/2}\vec{\alpha}\rangle\right\}, \quad (12.12)$$

где матрица  $D_0$  определена в (10.7), а матрица  $C(t)$  — решение системы в вариациях.

**Доказательство.** С учетом соотношений (11.4) оператор сдвига (12.2) представим в виде

$$\begin{aligned} \widehat{D}(\vec{\alpha}) &= \exp\{\langle\vec{\alpha}, \hat{a}^+(t)\rangle - \langle\vec{\alpha}^*, \hat{a}(t)\rangle\} = \exp\{\langle\vec{\beta}, \Delta\hat{p}\rangle + \langle\vec{\gamma}, \Delta\vec{x}\rangle\} = \\ &= \exp\left\{\frac{-i\hbar}{2}\langle\vec{\beta}, \vec{\gamma}\rangle\right\} \exp\{\langle\vec{\gamma}, \Delta\vec{x}\rangle\} \exp\{\langle\vec{\beta}, \Delta\hat{p}\rangle\}, \end{aligned} \quad (12.13)$$

где обозначено

$$\begin{aligned} \vec{\beta} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left[C^*(t)D_0^{-1/2}\vec{\alpha} - C(t)D_0^{-1/2}\vec{\alpha}^*\right] \\ \vec{\gamma} &= -\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left[B^*(t)D_0^{-1/2}\vec{\alpha} - B(t)D_0^{-1/2}\vec{\alpha}^*\right]. \end{aligned} \quad (12.14)$$

Таким образом, соотношение (12.2) запишется в виде

$$|\vec{\alpha}, t\rangle = \widehat{D}(\vec{\alpha})\Psi_0^{(0)}(\vec{x}, t) = \exp\left\{\frac{-i\hbar}{2}\langle\vec{\beta}, \vec{\gamma}\rangle\right\} \exp\{\langle\vec{\gamma}, \Delta\vec{x}\rangle - \langle\vec{P}(t), \vec{\beta}\rangle\} \Psi_0^{(0)}(\vec{x} - i\hbar\vec{\beta}, t). \quad (12.15)$$

Здесь  $\Psi_0^{(0)}(\vec{x}, t) = |0, t\rangle$  (11.5), следовательно,

$$\begin{aligned} \Psi_0^{(0)}(\vec{x} - i\hbar\vec{\beta}, t) &= \Psi_0^{(0)}(\vec{x}, t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[-i\hbar\langle\vec{P}(t), \vec{\beta}\rangle - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. -i\hbar\langle\Delta\vec{x}, Q(t)\vec{\beta}\rangle - \frac{\hbar^2}{2}\langle\vec{\beta}, Q(t)\vec{\beta}\rangle\right]\right\}. \end{aligned} \quad (12.16)$$

Заметим, что

$$\langle\Delta\vec{x}, \vec{\gamma}\rangle + \langle\Delta\vec{x}, Q(t)\vec{\beta}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\langle\Delta\vec{x}, [B^*(t) - B(t)C^{-1}(t)C^*(t)]D_0^{-1/2}\vec{\alpha}\rangle.$$

С учетом соотношения

$$\begin{aligned} B^*(t) - B(t)C^{-1}(t)C^*(t) &= \\ &= [B^*(t)\{C^{-1}(t)\}^* - B(t)C^{-1}(t)]C^*(t) = -2i\{C^{-1}(t)\}^\top D_0 \end{aligned}$$

получим

$$\langle\Delta\vec{x}, \vec{\gamma}\rangle + \langle\Delta\vec{x}, Q(t)\vec{\beta}\rangle = i\sqrt{\frac{2}{\hbar}}\langle\Delta\vec{x}, \{C^{-1}(t)\}^\top D_0^{1/2}\vec{\alpha}\rangle. \quad (12.17)$$

Аналогично найдём

$$\begin{aligned} -\frac{i\hbar}{2}[\langle\vec{\beta}, \vec{\gamma}\rangle + \langle\vec{\beta}, Q(t)\vec{\beta}\rangle] &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}}\langle\vec{\beta}, (C^{-1}(t))^\top D_0^{1/2}\vec{\alpha}\rangle = \\ &= \frac{1}{2}[\langle\vec{\alpha}, D_0^{-1/2}C^+(t)(C^{-1}(t))^\top D_0^{1/2}\vec{\alpha}\rangle - \langle\vec{\alpha}^*, \vec{\alpha}\rangle]. \end{aligned} \quad (12.18)$$

Подставив (12.16)–(12.18) в (12.15), получим

$$\begin{aligned} |\vec{\alpha}, t\rangle &= |0, t\rangle \exp \left\{ -\frac{|\vec{\alpha}|^2}{2} + i\sqrt{\frac{2}{\hbar}} \langle \Delta \vec{x}, \{C^{-1}(t)\}^\top D_0^{1/2} \vec{\alpha} \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \langle \vec{\alpha}, D_0^{-1/2} C^+(t) \{C^{-1}(t)\}^\top D_0^{1/2} \vec{\alpha} \rangle \right\}, \end{aligned} \quad (12.19)$$

что и требовалось показать.

**Свойство 12.7.** Производящая функция для квазиклассических ТКС  $|\nu, t\rangle$  в  $p$ -представлении имеет вид

$$\begin{aligned} |\widetilde{\vec{\alpha}}, t\rangle &= |0, t\rangle \exp \left\{ -\frac{|\vec{\alpha}|^2}{2} + i\sqrt{\frac{2}{\hbar}} \langle \Delta \vec{p}, (B^{-1}(t))^\top D_0^{1/2} \vec{\alpha} \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \langle \vec{\alpha}, D_0^{-1/2} B^+(t) \{B^{-1}(t)\}^\top D_0^{1/2} \vec{\alpha} \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (12.20)$$

**Доказательство.** Найдем функцию  $|\vec{\alpha}, t\rangle$  в  $p$ -представлении. По определению,

$$|\widetilde{\vec{\alpha}}, t\rangle = \frac{1}{(2\pi i\hbar)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} d\vec{x} e^{-i\langle \vec{p}, \vec{x} \rangle / \hbar} |\vec{\alpha}, t\rangle. \quad (12.21)$$

Сделаем в интеграле замену переменных  $\vec{\xi} = \Delta \vec{x} - i\hbar \vec{\beta}$  и с учетом (12.15) получим

$$\begin{aligned} |\widetilde{\vec{\alpha}}, t\rangle &= \frac{N_\hbar}{\sqrt{\det C(t)}} \exp \left\{ \frac{i\hbar}{2} \langle \vec{\beta}, \vec{\gamma} \rangle + \frac{i}{\hbar} \tilde{S}(t) - \frac{i}{\hbar} \langle \vec{X}(t), \Delta \vec{p} \rangle + \langle \Delta \vec{p}, \vec{\beta} \rangle \right\} \times \\ &\quad \times \frac{1}{(2\pi i\hbar)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} d\vec{\xi} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ -\langle \vec{\xi}, (\Delta \vec{p} + i\hbar \vec{\gamma}) \rangle + \frac{1}{2} \langle \vec{\xi}, Q(t) \vec{\xi} \rangle \right] \right\}, \end{aligned}$$

где обозначено

$$\tilde{S}(t) = \int_0^t (\langle \vec{P}(t), \dot{\vec{X}}(t) \rangle - \mathcal{H}(t)) dt - \langle \vec{X}(t), \vec{P}(t) \rangle.$$

Последний интеграл вычисляется при помощи соотношения

$$\int_{\mathbb{R}^n} d\vec{x} \exp \left[ -\frac{1}{2} \langle \vec{x}, \Gamma \vec{x} \rangle + \langle \vec{b}, \vec{x} \rangle \right] = \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det \Gamma}} \exp \left\{ \frac{\langle \vec{b}, \Gamma^{-1} \vec{b} \rangle}{2} \right\}, \quad (12.22)$$

в котором положим

$$\Gamma = -\frac{i}{\hbar} Q(t); \quad \vec{b} = -\frac{i}{\hbar} \Delta \vec{p} + \vec{\gamma}.$$

Тогда

$$|\widetilde{\vec{\alpha}}, t\rangle = |0, t\rangle \exp \left\{ \frac{i\hbar}{2} \langle \vec{\beta}, \vec{\gamma} \rangle + \langle \Delta \vec{p}, \vec{\beta} \rangle + \langle \Delta \vec{p}, Q^{-1}(t) \vec{\gamma} \rangle + \frac{i\hbar}{2} \langle \vec{\gamma}, Q^{-1}(t) \vec{\gamma} \rangle \right\}, \quad (12.23)$$

где

$$|0, t\rangle = \frac{N_\hbar}{\sqrt{\det(-B(t))}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \tilde{S}(t) - \langle \vec{X}(t), \Delta \vec{p} \rangle - \frac{1}{2} \langle \Delta \vec{p}, Q^{-1}(t) \Delta \vec{p} \rangle \right] \right\}. \quad (12.24)$$

Аналогично (12.17) и (12.18) получим

$$\begin{aligned} \langle \Delta \vec{p}, \vec{\beta} \rangle + \langle \Delta \vec{p}, Q^{-1}(t) \vec{\gamma} \rangle &= i \sqrt{\frac{2}{\hbar}} \langle \Delta \vec{p}, \{B^{-1}(t)\}^\top D_0^{1/2} \vec{\alpha} \rangle \\ \frac{i\hbar}{2} [\langle \vec{\beta}, \vec{\gamma} \rangle + \langle \vec{\gamma}, Q^{-1}(t) \vec{\gamma} \rangle] &= -\frac{|\vec{\alpha}|^2}{2} + \frac{1}{2} \langle \vec{\alpha}, D_0^{-1/2} B^+(t) \{B^{-1}(t)\}^\top D_0^{1/2} \vec{\alpha} \rangle, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

◇ Из соотношений (12.9) следует, что

$$|\widetilde{\vec{\alpha}}, t\rangle = e^{-|\vec{\alpha}|^2/2} \sum_{|\nu|=0}^{\infty} \frac{\vec{\alpha}^\nu}{\nu!} |\nu, t\rangle,$$

где  $|\widetilde{\vec{\alpha}}, t\rangle = F_{\hbar, \vec{x} \rightarrow \vec{p}} |\vec{\alpha}, t\rangle$ , а  $F_{\hbar, \vec{x} \rightarrow \vec{p}} - \hbar^{-1}$ -преобразование Фурье (12.21). Разложим функцию  $|\widetilde{\vec{\alpha}}, t\rangle$  (12.20), (12.24) в ряд по  $\vec{\alpha}$  и приравняем коэффициенты при одинаковых степенях  $\vec{\alpha}$ . В результате обнаружим, что функция  $|\nu, t\rangle$  получается из функции  $|\nu, t\rangle$  формальной заменой

$$\begin{aligned} \vec{x} &\rightarrow -\vec{p}, & \vec{X}(t) &\rightarrow -\vec{P}(t), & \vec{P}(t) &\rightarrow \vec{X}(t), \\ B(t) &\rightarrow C(t), & C(t) &\rightarrow -B(t). \end{aligned}$$

### 13. Многомерные полиномы Эрмита

При проведении конкретных вычислений иногда оказывается удобным вместо операторов  $\hat{a}_i(t)$   $\hat{a}_i^+(t)$  (11.4) использовать операторы  $\hat{\Lambda}_j(t)$ ,  $\hat{\Lambda}_j^+(t)$ :

$$\begin{aligned} \hat{\Lambda}_j^+(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar \operatorname{Im} b_j}} (\langle \vec{Z}_j^*(t), \hat{p} \rangle - \langle (\vec{W}_j^*(t) - Q(t) \vec{Z}_j^*(t)), \Delta \vec{x} \rangle), \\ \hat{\Lambda}_j(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar \operatorname{Im} b_j}} \langle \vec{Z}_j(t), \hat{p} \rangle, \quad j = \overline{1, n}, \end{aligned} \tag{13.1}$$

которые унитарно эквивалентны операторам  $\hat{a}_j^+(t)$ ,  $\hat{a}_j(t)$  при преобразованиях подобия

$$\begin{aligned} \hat{\Lambda}_j^+(t) &= \hat{K}_0^{-1} \hat{a}_j^+(t) \hat{K}_0 : L_h^t \rightarrow L_h^t, \\ \hat{\Lambda}_j(t) &= \hat{K}_0^{-1} \hat{a}_j(t) \hat{K}_0 : L_h^t \rightarrow L_h^t, \end{aligned}$$

где  $\hat{K}_0$  – оператор умножения на функцию  $\Psi_0^{(0)}(\vec{x}, t, \hbar) = |0, t\rangle$  (11.5) и  $L_h^t = L_2(\mathbb{R}_x^n, d\mu)$  с мерой  $d\mu = |\Psi_0^{(0)}|^2 d\vec{x}$ , и удовлетворяют стандартным бозевским коммутационным соотношениям [32]

$$[\hat{\Lambda}_k(t), \hat{\Lambda}_j^+(t)] = \delta_{kj}, \quad [\hat{\Lambda}_k(t), \hat{\Lambda}_j(t)] = [\hat{\Lambda}_k^+(t), \hat{\Lambda}_j^+(t)] = 0. \tag{13.2}$$

Определим функцию  $H_\nu$ :

$$H_\nu = |H_\nu\rangle = \frac{1}{\sqrt{\nu!}} \{\hat{\Lambda}^+(t)\}^\nu \cdot 1. \tag{13.3}$$

Из явного вида операторов  $\hat{\Lambda}_j(t)$ ,  $\hat{\Lambda}_k^+(t)$  следует, что

$$|\nu, t\rangle = |0, t\rangle H_\nu, \tag{13.4}$$

и поэтому

$$\exp \left\{ \langle \vec{\alpha}, W(t) \vec{\xi} \rangle - \frac{1}{2} \langle \vec{\alpha}, W(t) \vec{\alpha} \rangle \right\} = \sum_{|\nu|=0}^{\infty} \frac{\vec{\alpha}^{\nu}}{\sqrt{\nu!}} H_{\nu}(\vec{\xi}, t), \quad (13.5)$$

где

$$\begin{aligned} \vec{\xi} &= -i \sqrt{\frac{2}{\hbar}} D_0^{1/2} (C^*(t))^{-1} \Delta \vec{x}, \\ W(t) &= -D_0^{-1/2} (C^+(t)) (C^{-1}(t))^{\top} D_0^{1/2}. \end{aligned} \quad (13.6)$$

Из соотношения (13.5) следует, что  $H_{\nu}(\vec{\xi}, t)$  – многомерные полиномы Эрмита, порождаемые матрицей  $W(t)$  [10]. Тогда квазиклассические ТКС  $|\nu, t\rangle$  – многомерные функции Эрмита. Поскольку многомерные полиномы Эрмита полны [38] в  $L_2(\mathbb{R}^n, d\mu)$ ,  $d\mu = |\Psi_0|^2 d\vec{x}$ , то квазиклассические ТКС  $|\nu, t\rangle$  полны в  $L_2(\mathbb{R}^n, d\vec{x})$ .

Выделив в аргументе экспоненты в (13.5) полный квадрат и разложив полученное выражение в ряд Тейлора по  $\vec{\alpha}$ , получим следующее представление функций

$$H_{\nu}(\vec{\xi}, t) = \frac{1}{\sqrt{\nu!}} (-1)^{|\nu|} e^{\langle \vec{\xi}, W(t) \vec{\xi} \rangle / 2} \frac{\partial^{|\nu|}}{\partial \vec{\xi}^{\nu}} e^{-\langle \vec{\xi}, W(t) \vec{\xi} \rangle / 2} = \frac{(-1)^{|\nu|}}{\sqrt{\nu!}} \left( \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}} - W(t) \vec{\xi} \right)^{\nu} \cdot 1. \quad (13.7)$$

**Свойство 13.1.** Матрица  $W(t)$  симметрична и унитарна:

$$W(t) = W^{\top}(t), \quad W^{-1}(t) = W^+(t). \quad (13.8)$$

**Доказательство.** Действительно, из (13.6) и (10.9) следует

$$W^{-1}(t) = -D_0^{-1/2} C^t(t) (C^+(t))^{-1} D_0^{1/2} = W^*(t).$$

Аналогично

$$\begin{aligned} W^{\top}(t) &= -D_0^{1/2} C^{-1}(t) C^*(t) D_0^{-1/2} = -D_0^{1/2} C^{-1}(t) [C^*(t) D_0^{-1} C^{\top}(t)] (C^{-1}(t))^{\top} D_0^{1/2} = \\ &= -D_0^{1/2} C^{-1}(t) [C(t) D_0^{-1} C^+(t)] (C^{-1}(t))^{\top} D_0^{1/2} = W(t). \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались соотношением (10.23). Следовательно,  $W^*(t) = W^+(t)$ , и в результате получим (13.8).

**Свойство 13.2.** Справедливо тождество

$$\langle \vec{\xi}, W(t) \vec{\xi} \rangle = \frac{2}{\hbar} \langle \Delta \vec{x}, \text{Im } Q(t) \Delta \vec{x} \rangle. \quad (13.9)$$

**Доказательство.** Преобразуем матрицу  $W(t)$  (13.6):

$$\begin{aligned} W(t) &= -D_0^{-1/2} C^+(t) (C^{-1}(t))^{\top} D_0^{1/2} = \\ &= -D_0^{-1/2} C^+(t) (C^{-1}(t))^{\top} D_0 (C^{-1}(t))^* C^*(t) D_0^{-1/2} = \\ &= -D_0^{-1/2} C^+(t) [\text{Im } Q(t)] C^*(t) D_0^{-1/2}. \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались соотношением (10.16). Следовательно,

$$\langle \vec{\xi}, W(t) \vec{\xi} \rangle = -\langle (C^*(t) D_0^{-1/2} \vec{\xi}), \text{Im } Q(t) (C^*(t) D_0^{-1/2} \vec{\xi}) \rangle = \frac{2}{\hbar} \langle \Delta \vec{x}, \text{Im } Q(t) \Delta \vec{x} \rangle,$$

что и требовалось показать.

**Свойство 13.3.** Справедливо соотношение

$$\hat{\Lambda}^+(t) = -\frac{\partial}{\partial \vec{\xi}} + W(t)\vec{\xi} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}D_0^{-1/2}\{C^+(t)(-i\hbar\nabla + Q(t)\Delta\vec{x}) - B^+(t)\Delta\vec{x}\} \quad (13.10)$$

где  $\hat{\Lambda}(t)$  определено в (13.1).

**Доказательство.** Из (13.6) следует  $\Delta\vec{x} = i\sqrt{\hbar/2}C^*(t)D_0^{-1/2}\vec{\xi}$ , т.е.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}} &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}D_0^{-1/2}C^+(t)\frac{\partial}{\partial \vec{x}}, \\ W(t)\vec{\xi} &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}D_0^{1/2}C^{-1}(t)\Delta\vec{x} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}D_0^{-1/2}C^+(t)(C^+(t))^{-1}D_0C^{-1}(t)\Delta\vec{x} = \\ &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}D_0^{-1/2}C^+(t)\operatorname{Im}Q(t)\Delta\vec{x} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}D_0^{-1/2}C^+(t)[Q(t) - (C^{-1}(t))^+B^+(t)]\Delta\vec{x}. \end{aligned}$$

Подставив полученные выражения в левую часть (13.10), получим тождество.

◇ Предыдущее рассмотрение показывает, что система функций  $|\nu, t\rangle$  полна в пространстве  $\mathcal{P}_\hbar^t$  (8.5). Мы ограничиваемся здесь этим пространством, поскольку для наших целей существенно, что оно инвариантно относительно действия рассматриваемых операторов. Таким образом, каждой фиксированной классической траектории квазиклассическое квантование методом комплексного роста сопоставляет предгильбертово пространство  $\mathcal{P}_\hbar^t$ .

## 14. Функция Грина задачи Коши для уравнения Шрёдингера с квадратичным гамильтонианом

Функция Грина задачи Коши для квадратичных квантовых систем хорошо известна (см., например, [27]). Для полноты изложения приведем явный вид функции Грина  $G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s)$  в удобной для нас форме. По определению,

$$\begin{aligned} [-i\hbar\partial_t + \mathcal{H}_0(\hat{p}, \vec{x}, t)]G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s) &= 0, \\ \lim_{t \rightarrow s} G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s) &= \delta(\vec{x} - \vec{y}), \end{aligned} \quad (14.1)$$

где оператор  $\mathcal{H}_0$  определен в (9.2). Рассмотрение проведем в предположении, что

$$\det \mathcal{H}_{pp}(s) \neq 0, \quad \det \left\| \frac{\partial p_k(t, z_0)}{\partial p_{0j}} \right\| \neq 0. \quad (14.2)$$

В рассматриваемой задаче известны точные решения уравнения Шрёдингера (11.17) – функции  $|\nu, t\rangle$  (11.6) и  $|\vec{\alpha}, t\rangle$  (12.2), образующие полную и переполненную системы, соответственно. Поэтому

$$\begin{aligned} G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s) &= \sum_{|\nu|=0}^{\infty} |\nu, t\rangle \langle s, \nu|, \\ G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s) &= \frac{1}{\pi^n} \int d\vec{\alpha}_1 d\vec{\alpha}_2 |\vec{\alpha}, t\rangle \langle s, \vec{\alpha}|, \end{aligned} \quad (14.3)$$

где

$$\vec{\alpha}_1 = \operatorname{Re} \vec{\alpha}, \quad \vec{\alpha}_2 = \operatorname{Im} \vec{\alpha}.$$

Детали подобных вычислений можно найти, например, в [27]. Однако для наших целей представляется удобным рассмотреть следующий подход.



Решения уравнения (14.1) будем искать в виде

$$G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s) = \int_{\mathbb{R}^n} \frac{d\vec{p}}{(-2\pi i\hbar)^{n/2}} \tilde{G}^{(0)}(\vec{p}, \vec{y}, t, s) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \langle \vec{x}, \vec{p} \rangle \right\}. \quad (14.4)$$

Подставим (14.4) в (14.1) и проведем  $\hbar^{-1}$ -преобразование Фурье полученного выражения. Для определения  $\tilde{G}^{(0)}(\vec{p}, \vec{y}, t, s)$  запишем уравнение

$$\begin{aligned} [-i\hbar\partial_t + \tilde{\mathcal{H}}_0(\hat{\vec{p}}, \hat{\vec{x}}, t)] \tilde{G}^{(0)}(\vec{p}, \vec{y}, t, s) &= 0, \\ \lim_{t \rightarrow s} \tilde{G}(\vec{p}, \vec{y}, t, s) &= \frac{1}{(2\pi i\hbar)^{n/2}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \langle \vec{p}, \vec{y} \rangle \right\}, \end{aligned} \quad (14.5)$$

где

$$\hat{\vec{p}} = \vec{p}, \quad \hat{\vec{x}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}}, \quad \tilde{\mathcal{H}}_0(\vec{p}, \vec{x}, t) = \mathcal{H}_0(\vec{p}, \vec{x}, t).$$

Решение уравнения (14.5) будем искать в виде

$$\begin{aligned} \tilde{G}^{(0)}(\vec{p}, \vec{y}, t, s) &= \frac{1}{(2\pi i\hbar)^{n/2}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left[ S_0(t) + \langle \vec{G}(t), \Delta \vec{p} \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta \vec{p}, \tilde{Q}(t) \Delta \vec{p} \rangle \right] \right\}, \\ \Delta \vec{p} &= \vec{p} - \vec{P}(t). \end{aligned} \quad (14.6)$$

Из (14.5) следует, что

$$\lim_{t \rightarrow s} \tilde{Q}(t) = 0, \quad \lim_{t \rightarrow s} \vec{G}(t) = \vec{y}, \quad \lim_{t \rightarrow s} S_0(t) = \langle \vec{p}_0, \vec{y} \rangle. \quad (14.7)$$

Подставим (14.6) в (14.5) и получим

$$\begin{aligned} \tilde{G}^{(0)}(\vec{p}, \vec{y}, t, s) \left\{ -\dot{S}_0(t) - \langle \dot{\vec{G}}(t), \Delta \vec{p} \rangle + \langle \vec{G}(t), \dot{\vec{P}}(t) \rangle - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \langle \Delta \vec{p}, \dot{\tilde{Q}} \Delta \vec{p} \rangle + \langle \dot{\vec{P}}(t), \tilde{Q}(t) \Delta \vec{p} \rangle + \mathcal{H}(t) + \right. \\ \left. + \langle \mathcal{H}_{\vec{x}}(t), (\vec{G}(t) + \tilde{Q}(t) \Delta \vec{p} - \vec{X}(t)) \rangle + \langle \mathcal{H}_p(t), \Delta \vec{p} \rangle + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} [ \langle (\vec{G}(t) + \tilde{Q}(t) \Delta \vec{p} - \vec{X}(t)), \mathcal{H}_{xx}(t) (\vec{G}(t) + \tilde{Q}(t) \Delta \vec{p} - \vec{X}(t)) \rangle + \right. \\ \left. + \langle (\tilde{G}(t) + \tilde{Q}(t) \Delta \vec{p} - \vec{X}(t)), \mathcal{H}_{xp}(t) \Delta \vec{p} \rangle + \langle \Delta \vec{p}, \mathcal{H}_{pp}(t) \Delta \vec{p} \rangle + \right. \\ \left. + \langle \Delta \vec{p}, \mathcal{H}_{px}(t) (\tilde{G}(t) + \tilde{Q}(t) \Delta \vec{p} - \vec{X}(t)) \rangle \right] + \frac{i\hbar}{2} \text{Sp} [\mathcal{H}_{xx}(t) \tilde{Q}(t) + \mathcal{H}_{xp}(t)] \left. \right\} = 0. \end{aligned}$$

Приравняв слагаемые при одинаковых степенях  $\Delta \vec{p}$ , получим следующую систему уравнений:

$$-\dot{\tilde{Q}} + \mathcal{H}_{px}(t) \tilde{Q} + \tilde{Q} \mathcal{H}_{xp}(t) + \tilde{Q} \mathcal{H}_{xx}(t) \tilde{Q} + \mathcal{H}_{pp}(t) = 0, \quad (14.8)$$

$$-(\dot{\vec{G}} - \dot{\vec{X}}(t)) + \tilde{Q}(t) \mathcal{H}_{xx}(t) [\vec{G} - \vec{X}(t)] + \mathcal{H}_{px}(t) [\vec{G} - \vec{X}(t)] = 0, \quad (14.9)$$

$$\begin{aligned} -\dot{S}_0 + \langle \vec{X}(t), \dot{\vec{P}}(t) \rangle + \mathcal{H}(t) + \frac{i\hbar}{2} \text{Sp} [\mathcal{H}_{xx}(t) \tilde{Q}(t) + \mathcal{H}_{xp}(t)] + \\ + \frac{1}{2} \langle (\vec{G}(t) - \vec{X}(t)), \mathcal{H}_{xx}(t) (\vec{G}(t) - \vec{X}(t)) \rangle = 0 \end{aligned} \quad (14.10)$$

с начальными условиями (14.7).

Пусть  $\tilde{B}(t)$  и  $\tilde{C}(t)$  – решения системы в вариациях (10.1) с начальными условиями

$$\tilde{B}(t)|_{t=s} = B_0(s), \quad \tilde{C}(t)|_{t=s} = 0, \quad B_0^T(s) = B_0(s) \quad (14.11)$$

и матрица  $\text{Im } B_0(s)$  положительно определена.

Тогда, если предположение (14.2) справедливо, то решение задачи Коши (10.1), (14.11) имеет вид (10.34):

$$\tilde{B}(t) = \lambda_4^{\Gamma}(t, s)B_0(s), \quad \tilde{C}(t) = -\lambda_3^{\Gamma}(t, s)B_0(s), \quad \Delta t = t - s, \quad (14.12)$$

где обозначено  $\lambda_k^{\Gamma}(t, s)$ ,  $k = \overline{1, 4}$  определены в (10.36).

Тогда функция

$$\tilde{Q}(t) = \tilde{C}(t)\tilde{B}^{-1}(t) = -\lambda_3^{\Gamma}(t, s)(\lambda_4^{-1}(t, s))^{\Gamma} \quad (14.13)$$

удовлетворяет уравнению (14.8) с начальным условием (14.7).

При условии (14.2) из (10.29), (10.27) следует

$$\vec{G}(t) = (\tilde{B}^{-1}(t))^{\Gamma} B_0^{\Gamma}(s)(\vec{y} - \vec{x}_0) + \vec{X}(t) = \lambda_4^{-1}(t, s)(\vec{y} - \vec{x}_0) + \vec{X}(t). \quad (14.14)$$

Аналогично для  $S_0(t)$  получим

$$\begin{aligned} S_0(t) &= \int_s^t [\mathcal{H}(\tau) + \langle \vec{X}(\tau), \dot{\vec{P}}(\tau) \rangle] d\tau + \frac{i\hbar}{2} \int_s^t d\tau \text{Sp} [\mathcal{H}_{xp}(\tau) + \mathcal{H}_{xx}(\tau)\tilde{Q}(\tau)] + \\ &+ \langle \vec{p}_0, \vec{y} \rangle + \frac{1}{2} \int_s^t d\tau \langle (\vec{G}(\tau) - \vec{X}(\tau), \mathcal{H}_{xx}(\tau)[\vec{G}(\tau) - \vec{X}(\tau)] \rangle. \end{aligned} \quad (14.15)$$

В силу (10.29) и леммы Лиувилля (10.19) получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_s^t d\tau \text{Sp} [\mathcal{H}_{xp}(\tau) + \mathcal{H}_{xx}(\tau)\tilde{Q}(\tau)] &= \frac{1}{2} \ln \det \tilde{B}^{-1}(\tau) \Big|_s^t = \\ &= \frac{1}{2} \ln \left( \frac{\det B_0(s)}{\det \tilde{B}(t)} \right) = -\frac{1}{2} \ln \det \lambda_4(t, s). \end{aligned} \quad (14.16)$$

При вычислении последнего интеграла в (14.15) воспользуемся соотношением (10.45) и с учетом (14.14) получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_s^t d\tau \langle (\vec{G}(\tau) - \vec{X}(\tau), \mathcal{H}_{xx}(\tau)(\vec{G}(\tau) - \vec{X}(\tau)) \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} \langle (\vec{y} - \vec{x}_0), \lambda_2(t, s)\lambda_4^{-1}(t, s)(\vec{y} - \vec{x}_0) \rangle. \end{aligned} \quad (14.17)$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} S_0(t) &= \int_s^t [\mathcal{H}(\tau) + \langle \vec{X}(\tau), \dot{\vec{P}}(\tau) \rangle] d\tau - \frac{i\hbar}{2} \ln(\det \lambda_4(t, s)) + \\ &+ \frac{1}{2} \langle (\vec{y} - \vec{x}_0), \lambda_2(t, s)\lambda_4^{-1}(t, s)(\vec{y} - \vec{x}_0) \rangle + \langle \vec{p}_0, \vec{y} \rangle. \end{aligned} \quad (14.18)$$

Подставив (14.18), (14.14) и (14.13) в (14.6), получим хорошо известное выражение (см., например, [27])

$$\tilde{G}^{(0)}(\vec{p}, \vec{y}, t, s) = \frac{1}{(2\pi i\hbar)^{n/2}} \frac{1}{\sqrt{\det \lambda_4(t, s)}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_s^t [\mathcal{H}(\tau) + \langle \vec{X}(\tau), \dot{\vec{P}}(\tau) \rangle] d\tau - \right.$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{i}{\hbar}\langle \vec{p}_0, \vec{y} \rangle - \frac{i}{2\hbar}\langle (\vec{y} - \vec{x}_0), \lambda_2(t, s)\lambda_4^{-1}(t, s)(\vec{y} - \vec{x}_0) \rangle - \frac{i}{\hbar}\langle \Delta\vec{p}, \vec{X}(t) \rangle - \\
& -\frac{i}{\hbar}\langle \Delta\vec{p}, \lambda_4^{-1}(t, s)(\vec{y} - \vec{x}_0) \rangle + \frac{i}{2\hbar}\langle \Delta\vec{p}, \lambda_4^{-1}(t, s)\lambda_3(t, s)\Delta\vec{p} \rangle \}. \quad (14.19)
\end{aligned}$$

Подставим (14.19) в (14.4) и воспользуемся соотношением (12.22), в котором положим

$$\Gamma = -\frac{i}{\hbar}\lambda_4^{-1}(t, s)\lambda_3(t, s), \quad \vec{b} = -\frac{i}{\hbar}[\vec{X}(t) - \vec{x} + \lambda_4^{-1}(t, s)(\vec{y} - \vec{x}_0)].$$

Получим

$$\begin{aligned}
G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s) &= \frac{1}{\sqrt{\det(-i2\pi\hbar\lambda_3(t, s))}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \int_s^t [\langle \vec{P}(\tau), \dot{\vec{X}}(\tau) \rangle - \mathcal{H}(\tau)] d\tau + \right. \right. \\
& + \langle \vec{P}(t), \Delta\vec{x} \rangle - \langle \vec{p}_0, (\vec{y} - \vec{x}_0) \rangle - \frac{1}{2}\langle (\vec{y} - \vec{x}_0), \lambda_1(t, s)\lambda_3^{-1}(t, s)(\vec{y} - \vec{x}_0) \rangle + \\
& \left. \left. + \langle \Delta\vec{x}, \lambda_3^{-1}(t, s)(\vec{y} - \vec{x}_0) \rangle - \frac{1}{2}\langle \Delta\vec{x}, \lambda_3^{-1}(t, s)\lambda_4(t, s)\Delta\vec{x} \rangle \right] \right\}. \quad (14.20)
\end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались соотношениями

$$\lambda_1^T(t, s)\lambda_4(t, s) - \lambda_3^T(t, s)\lambda_2(t, s) = \mathbb{I}_{n \times n}, \quad \lambda_3(t, s)\lambda_4^T(t, s) - \lambda_4(t, s)\lambda_3^T(t, s) = 0,$$

которые следуют из (10.7), (10.22) и (10.34).

Рассмотрим предел выражения (14.20) при  $\Delta t = t - s \rightarrow 0$ . Получим

$$\begin{aligned}
\lambda_1(t, s) &= \mathbb{I}_{n \times n} + O(\Delta t), \quad \lambda_3^T(t, s) = -\mathcal{H}_{pp}(s)\Delta t + O((\Delta t)^2), \\
\lambda_3^{-1}(t, s) &= -\frac{1}{\Delta t}\mathcal{H}_{pp}^{-1}(s) + O((\Delta t)^0), \quad \lambda_4(t, s) = \mathbb{I}_{n \times n} + O(\Delta t), \quad \lambda_2(t, s) = O(\Delta t).
\end{aligned}$$

Следовательно, на коротком временном интервале имеем

$$\begin{aligned}
\lim_{\Delta t \rightarrow 0} G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s) &= \frac{1}{\sqrt{\det(-i2\pi\hbar\Delta t\mathcal{H}_{pp}(s))}} \times \\
& \times \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar\Delta t} \langle (\vec{x} - \vec{y}), \mathcal{H}_{pp}^{-1}(s)(\vec{x} - \vec{y}) \rangle + O(\Delta t^0) \right\}. \quad (14.21)
\end{aligned}$$

## 15. Асимптотики и формула Дюамеля

Точное решение  $\Psi$  задачи Коши для уравнения Шрёдингера (8.2) может быть представлено через асимптотические решения того же самого уравнения с помощью формулы Дюамеля, которой мы и посвятим настоящий раздел.

Пусть  $u = u(\vec{x}, t, \hbar)$  — решение неоднородного уравнения Шрёдингера

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{\mathcal{H}}(t) \right) u = f(\vec{x}, t, \hbar), \quad 0 \leq t \leq T, \quad (15.1)$$

с однородным начальным условием

$$u|_{t=0} = 0. \quad (15.2)$$

Обозначим через  $w = w(\vec{x}, t, \tau, \hbar)$  однопараметрическое ( $\tau \in [0, T]$  — параметр) решение задачи Коши соответствующего однородного уравнения

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{\mathcal{H}}(t) \right) w = 0, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (15.3)$$

$$w(\vec{x}, t, \tau, \hbar) \Big|_{t=\tau} = f(\vec{x}, \tau, \hbar). \quad (15.4)$$

Пусть  $\widehat{U}_\hbar = \widehat{U}_\hbar(t, \tau)$  — оператор эволюции для уравнения (15.3) (если гамильтониан  $\widehat{\mathcal{H}}(t)$  не зависит от  $t$ , мы получим  $\widehat{U}_\hbar(t, \tau) = \exp[-i\hbar^{-1}\widehat{\mathcal{H}}(t - \tau)]$ ). Тогда

$$w(\vec{x}, t, \tau, \hbar) = \widehat{U}_\hbar(t, \tau)f(\vec{x}, \tau, \hbar), \quad \widehat{U}_\hbar^+ = \widehat{U}_\hbar^{-1}.$$

Справедливо следующее интегральное представление задачи Коши (15.1), (15.2) через решение задачи Коши (15.3), (15.4) (формула Дюамеля):

$$u(\vec{x}, t, \hbar) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t w(\vec{x}, t, \tau, \hbar) d\tau = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \widehat{U}_\hbar(t, \tau)f(\vec{x}, \tau, \hbar) d\tau. \quad (15.5)$$

С точки зрения формальных вычислений, эта формула проверяется прямой подстановкой в (15.1), (15.2) значения производной по  $t$  с учетом в (15.4) соотношений

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \int_0^t w(\vec{x}, t, \tau, \hbar) d\tau \right) &= \int_0^t \frac{\partial w(\vec{x}, t, \tau, \hbar)}{\partial t} d\tau + w(\vec{x}, t, \tau, \hbar) \Big|_{t=\tau} = \\ &= \int_0^t \frac{1}{i\hbar} \widehat{\mathcal{H}}(t) w(\vec{x}, t, \tau, \hbar) d\tau + f(\vec{x}, t, \hbar). \end{aligned}$$

Если в начальный момент времени  $\Psi(\vec{x}, 0, \hbar) = \Psi_{\text{as}}^{(N)}(\vec{x}, 0, \hbar)$ , то разность между точным и приближенным решениями

$$u(\vec{x}, t, \hbar) = \Psi(\vec{x}, t, \hbar) - \Psi_{\text{as}}^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar),$$

очевидно, является решением задачи Коши (15.1), (15.2) с правой частью  $f(\vec{x}, t, \hbar) = g^{(M)}(\vec{x}, t, \hbar)$ , где  $g^{(M)}$  — невязка приближенного решения (8.20).

В результате из (15.5) получим следующее представление для точного решения  $\Psi$ :

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{x}, t, \hbar) - \Psi_{\text{as}}^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar) &= g_1^{(M)}(\vec{x}, t, \hbar), \quad 0 \leq t \leq T, \\ g_1^{(M)}(\vec{x}, t, \hbar) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \widehat{U}_\hbar(t, \tau) g^{(M)}(\vec{x}, \tau, \hbar) d\tau. \end{aligned} \quad (15.6)$$

Для  $L_2$ -нормы невязки  $g^{(M)}$  справедлива следующая оценка по параметру  $\hbar \rightarrow 0$ :

$$\max_{0 \leq t \leq T} \|g^{(M)}(\vec{x}, t, \hbar)\|_{L_2} = C_g(T) \hbar^M. \quad (15.7)$$

В силу унитарности оператора эволюции  $\|\widehat{U}_\hbar(t, \tau)\|_{L_2 \rightarrow L_2} = 1$  из (15.6) нетрудно получить оценку  $L_2$ -нормы функции  $g_1$  через  $L_2$ -норму невязки  $g^{(M)}$  для произвольного конечного промежутка времени  $[0, T]$

$$\begin{aligned} \|g_1^{(M)}(\vec{x}, t, \hbar)\|_{L_2} &= \frac{1}{\hbar} \left\| \int_0^t \widehat{U}_\hbar(t, \tau) g^{(M)}(\vec{x}, \tau, \hbar) d\tau \right\|_{L_2} \leq \frac{1}{\hbar} \int_0^t \|\widehat{U}_\hbar(t, \tau) g^{(M)}(\vec{x}, \tau, \hbar)\| d\tau = \\ &= \frac{1}{\hbar} \int_0^t \|\widehat{U}_\hbar(t, \tau)\|_{L_2 \rightarrow L_2} \|g^{(M)}(\vec{x}, \tau, \hbar)\|_{L_2} d\tau \leq \end{aligned}$$

$$\leq \frac{1}{\hbar} \int_0^T \|g^{(M)}(\vec{x}, \tau, \hbar)\|_{L_2} d\tau \leq \frac{T}{\hbar} \max_{0 \leq \tau \leq T} \|g^{(M)}(\vec{x}, \tau, \hbar)\|_{L_2}. \quad (15.8)$$

Из последнего соотношения и из (15.7) получим *верхнюю оценку* по параметру  $\hbar$ ,  $\hbar \rightarrow 0$ , для «разности» (в  $L_2$ -норме) между точным  $\Psi$  и приближенным  $\Psi_{\text{as}}^{(N)}$  решениями

$$\max_{0 \leq t \leq T} \|\Psi(\vec{x}, t, \hbar) - \Psi_{\text{as}}^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar)\|_{L_2} \leq C_1(T) \hbar^{M-1}, \quad 0 \leq t \leq T.$$

Здесь

$$C_1(T) = TC_g(T),$$

а  $C_g(T)$  — константа из соотношения (15.7).

## 16. Конструкция квазиклассических ТКС уравнения Шрёдингера

Для уравнения Шрёдингера (19.8) поставим задачу Коши

$$\Psi|_{t=0} = \Phi_0(\vec{x}),$$

где  $\Phi_0(\vec{x})$  квазиклассически сосредоточена в точке  $z_0 = (\vec{p}_0, \vec{x}_0)$ . Ее решение будем искать в классе функций  $\mathcal{P}_\hbar^t$ , отвечающем решению системы Гамильтона  $\vec{X}(t)$ ,  $\vec{P}(t)$ :

$$\dot{\vec{x}} = \mathcal{H}_{\vec{p}}, \quad \dot{\vec{p}} = -\mathcal{H}_{\vec{x}}, \quad \vec{x}(0) = \vec{x}_0, \quad \vec{p}(0) = \vec{p}_0, \quad (16.1)$$

с функцией Гамильтона  $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{x}, t)$  — символом оператора  $\widehat{\mathcal{H}}$ .

Для решения поставленной задачи (Коши) нам потребуются следующие свойства функций  $\Phi \in \mathcal{P}_\hbar^t$ .

Оператор  $\widehat{\mathcal{H}}(t)$  (8.2) представим в виде

$$\widehat{\mathcal{H}}(t) = \widehat{\mathcal{H}}_0(t) + \widehat{\mathcal{H}}_1(t), \quad (16.2)$$

где  $\widehat{\mathcal{H}}_0(t)$  — квадратичная часть гамильтониана  $\widehat{\mathcal{H}}(t)$ :

$$\widehat{\mathcal{H}}_0(t) = \mathcal{H}(t) + \hat{\delta}^1 \mathcal{H}(t) + \hat{\delta}^2 \mathcal{H}(t), \quad (16.3)$$

а оператор  $\widehat{\mathcal{H}}_1(t)$  имеет вид

$$\widehat{\mathcal{H}}_1(t) = \widehat{\mathcal{H}}(t) - \widehat{\mathcal{H}}_0(t) = \sum_{k=3}^{N+2} \frac{1}{k!} \hat{\delta}^k \mathcal{H}(t) + \widehat{O}(\hbar^{(N+3)/2}). \quad (16.4)$$

Здесь через  $\hat{\delta}^k \mathcal{H}(t)$  обозначен оператор

$$\hat{\delta}^k \mathcal{H}(t) = \sum_{|\alpha|=k} \frac{\partial^{|\alpha|} \mathcal{H}(t)}{\partial z^\alpha} \{\Delta \hat{z}\}^\alpha. \quad (16.5)$$

Поскольку старшая часть оператора  $\widehat{\mathcal{H}}_1(t)$  (16.4) — оператор  $\hat{\delta}^3 \mathcal{H}(t)$  имеет при  $\hbar \rightarrow 0$  порядок  $\widehat{O}(\hbar^{3/2})$ , оператор  $\widehat{\mathcal{H}}_1$  естественно считать возмущением при  $\hbar \rightarrow 0$  по отношению к «невозмущенному» гамильтониану  $\widehat{\mathcal{H}}_0$  (16.3). Заметим, что функции  $|\nu, t\rangle$  (11.6), образующие полный набор (12.2), являются точными решениями уравнения Шрёдингера (11.18) с гамильтонианом  $\widehat{\mathcal{H}}_0$ . Тогда решение возмущенной задачи с гамильтонианом (8.2) будем искать в виде

$$\Psi_\nu(\vec{x}, t, \hbar) = |\nu, t\rangle + \varphi_1^\nu(\vec{x}, t, \hbar),$$

где  $\varphi_1^\nu(\vec{x}, t, \hbar)$  – неизвестная функция из класса  $\mathcal{P}_\hbar^t$ , очевидно удовлетворяющая уравнению

$$\left(\partial_t + \frac{i}{\hbar}\widehat{\mathcal{H}}_0 + \frac{i}{\hbar}\widehat{\mathcal{H}}_1\right)\varphi_1^\nu(\vec{x}, t, \hbar) = -\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathcal{H}}_1|\nu, t\rangle. \quad (16.6)$$

Для построения формального асимптотического решения этого уравнения воспользуемся тождеством

$$\begin{aligned} (\widehat{A} + \epsilon\widehat{B})^{-1} &= \widehat{A}^{-1} \sum_{n=0}^N (-1)^n (\epsilon\widehat{B}\widehat{A}^{-1})^n + \\ &+ \epsilon^{N+1} (-1)^{N+1} (\widehat{A} + \epsilon\widehat{B})^{-1} (\widehat{B}\widehat{A}^{-1})^{N+1}, \quad \epsilon \rightarrow 0, \end{aligned} \quad (16.7)$$

положив в нем

$$\widehat{A} = \partial_t + \frac{i}{\hbar}\widehat{\mathcal{H}}_0, \quad \epsilon\widehat{B} = \frac{i}{\hbar}\widehat{\mathcal{H}}_1 = \widehat{O}(\hbar^{1/2}).$$

◇ Тождество (16.7) справедливо для любых двух операторов  $\widehat{A}$  и  $\widehat{B}$  таких, что существует  $(\widehat{A} + \epsilon\widehat{B})^{-1}$  [29].

Оператор  $\widehat{A}^{-1}$  задается равенством

$$\widehat{A}^{-1}\Phi = \left(\partial_t + \frac{i}{\hbar}\widehat{\mathcal{H}}_0\right)^{-1} \Phi = \int_{\mathbb{R}^n} d\vec{y} \int_s^t G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s) \Phi(\vec{y}, s) ds, \quad (16.8)$$

где  $G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s)$  – функция Грина уравнения (14.1):

$$\begin{aligned} \{-i\hbar\partial_t + \widehat{\mathcal{H}}_0\}G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s) &= 0, \\ \lim_{t \rightarrow s} G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s) &= \delta(\vec{x} - \vec{y}), \end{aligned} \quad (16.9)$$

а явный вид функции  $G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s)$  задан формулой (14.20). Для практических расчетов удобно использовать разложение функции Грина  $G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s)$  по ортонормированной системе функций

$$G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s) = \sum_{|\nu|=0}^{\infty} |\nu, t\rangle \langle s, \nu|. \quad (16.10)$$

При вычислении матричных элементов с учетом соотношений (11.8) и тождества (11.13) ряд по  $\nu$  можно оборвать. Тогда решение уравнения Шрёдингера в виде формального асимптотического ряда по степеням  $\sqrt{\hbar}$ ,  $\hbar \rightarrow 0$ , примет вид

$$\begin{aligned} \Psi_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar) &= |\nu, t\rangle + (\widehat{A} + \epsilon\widehat{B})^{-1} \left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathcal{H}}_1|\nu, t\rangle\right) = \\ &= |\nu, t\rangle + \sum_{|\nu'|=0}^{\infty} |\nu', t\rangle \int_0^t dt \langle t, \nu' | \left[ \sum_{k=0}^{N-1} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \left( \sum_{|\nu''|=0}^{\infty} \widehat{\mathcal{H}}_1 |\nu'', t\rangle \times \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \int_0^t dt \langle t, \nu'' | \right)^k \right] \left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathcal{H}}_1|\nu, t\rangle\right) + \widehat{O}(\hbar^{(N+1)/2}) = \\ &= \sum_{k=0}^N \left[ -\frac{i}{\hbar}\widehat{\mathcal{K}}_1(t) \right]^k |\nu, t\rangle + \widehat{O}(\hbar^{(N+1)/2}); \end{aligned} \quad (16.11)$$

$$\begin{aligned}\widehat{\mathcal{K}}_1(t)\phi(t) &= \sum_{|\nu'|=0}^{\infty} |\nu', t\rangle \int_0^t d\tau \langle \tau, \nu' | \widehat{\mathcal{H}}_1(\tau) | \phi(\tau) \rangle = \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} d\vec{y} \int_0^t d\tau G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, \tau) \widehat{\mathcal{H}}_1(\tau) \phi(\vec{y}, \tau).\end{aligned}$$

**Теорема 16.1.** Пусть символ оператора  $\widehat{\mathcal{H}}_1(t)$  (8.2) удовлетворяет предположению 1,  $\vec{X}(t)$  и  $\vec{P}(t)$  – некоторое фиксированное на интервале  $[0, T]$  решение системы Гамильтона (9.6), а  $|\nu, t\rangle$  – отвечающий им базис в  $\mathcal{P}_h^t$ . Тогда функции  $\Psi_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar)$  (16.11)

1) являются асимптотическими ( $\text{mod } \hbar^{(N+3)/2}$ ,  $\hbar \rightarrow 0$ ) решениями уравнения Шрёдингера (8.2), т.е.

$$\begin{aligned}\{-i\hbar\partial_t + \widehat{\mathcal{H}}\}\Psi_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar) &= f_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar), \\ \|f_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar)\| &= O(\hbar^{(N+3)/2}), \quad t \in [0, T], \quad N = \overline{0, \infty};\end{aligned}$$

2) являются асимптотическими ( $\text{mod } \hbar^{(N+1)/2}$ ,  $\hbar \rightarrow 0$ ) решениями задачи Коши для уравнения (8.2) с начальным условием  $\Psi|_{t=0} = |\nu, 0\rangle$ , т.е.

$$\|\widehat{U}_\hbar(t, 0)|\nu, 0\rangle - \Psi_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar)\|_{L_2} < C_\nu^{(N)}(T)\hbar^{(N+1)/2}, \quad 0 < t \leq T,$$

где  $\widehat{U}_\hbar(t, 0)$  – унитарный оператор эволюции уравнения (8.2),  $C_\nu^{(N)}(T)$  – некоторая константа, не зависящая от  $\hbar$ ;

3) образуют (с точностью до  $O(\hbar^{(N+1)/2})$ ) ортонормированный набор состояний

$$\langle \Psi_{\nu'}^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar) | \Psi_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar) \rangle = \delta_{\nu\nu'} + O(\hbar^{(N+1)/2}). \quad (16.12)$$

**Доказательство.** 1. Невязку  $f_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar)$  можно представить в виде

$$\begin{aligned}f_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar) &= \left[ \widehat{\mathcal{H}}(t) - \sum_{k=0}^{N+2} \frac{1}{k!} (\delta^k \mathcal{H}(t)) \right] \Psi_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar) + \\ &+ \sum_{k=1}^N \sum_{j=0}^k (\delta^{k+j+3} \mathcal{H}(t)) (\Psi_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar) - \Psi_\nu^{(N-j)}(\vec{x}, t, \hbar)).\end{aligned} \quad (16.13)$$

Из явного вида функции  $\Psi_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar)$  (16.11) следует, что для  $N < \infty$ ,  $\Psi_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar) \in \mathcal{P}_h^t$  и, кроме того, для  $k < \infty$  операторы  $\delta^k \mathcal{H}(t) : \mathcal{P}_h^t \rightarrow \mathcal{P}_h^t$ , тогда из (16.13) получаем  $f_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar) \in \mathcal{P}_h^t$ , и, следовательно, согласно теореме 8.2,  $\|f_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar)\| = O(\hbar^{(N+3)/2})$ .

2. В соответствии с принципом Дюамеля запишем

$$\widehat{U}_\hbar(t, 0)|\nu, 0\rangle = \Psi_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \widehat{U}_\hbar(t, \tau) f_\nu^{(N)}(\vec{x}, \tau, \hbar) d\tau. \quad (16.14)$$

Отсюда, учитывая унитарность оператора  $\widehat{U}_\hbar(t, \tau)$  и непрерывную зависимость функции  $f_\nu^{(N)}$  от  $\tau$  на отрезке  $[0, T]$ , имеем:

$$\|\widehat{U}_\hbar(t, 0)|\nu, 0\rangle - \Psi_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar)\| = \frac{1}{\hbar} \left\| \int_0^t \widehat{U}_\hbar(t, \tau) f_\nu^{(N)}(\vec{x}, \tau, \hbar) d\tau \right\| \leq$$

$$\leq \frac{1}{\hbar} \int_0^t \|\widehat{U}_\hbar(t, \tau)\| \cdot \|f_\nu^{(N)}(\vec{x}, \tau, \hbar)\| d\tau \leq \frac{T}{\hbar} \max_{0 \leq t \leq T} \|f_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar)\| = C_\nu(T) \hbar^{(N+1)/2}.$$

3. Соотношения (16.12) следуют непосредственно из

$$\begin{aligned} \langle 0, \nu' | \nu, 0 \rangle &= \delta_{\nu\nu'}, \\ \frac{d}{dt} \langle \Psi_{\nu'}^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar) | \Psi_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar) \rangle &= O(\hbar^{(N+1)/2}). \end{aligned}$$

Таким образом, теорема доказана.

## 17. Квазиклассическая функция Грина задачи Коши в пространстве траекторно сосредоточенных функций

Явный вид функции  $\Psi_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar)$  (16.11) позволяет получить выражение для функции Грина  $G^{(N)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s, z_0)$  задачи Коши в классе траекторно сосредоточенных функций на интервале  $t \in [0, T]$ . Действительно, для любой функции  $\varphi(\vec{x}) \in \mathcal{P}_\hbar^0$  существует разложение в ряд по полному в  $\mathcal{P}_\hbar^0$  набору функций  $|\nu, 0\rangle$ :

$$\varphi(\vec{x}) = \sum_{|\nu|=0}^{\infty} C_\nu |\nu, 0\rangle. \quad (17.1)$$

Тогда для решения задачи Коши

$$\{-i\hbar\partial_t + \widehat{\mathcal{H}}\}\Phi = 0, \quad \Phi(\vec{x}, t, \hbar)|_{t=0} = \varphi(\vec{x}) \quad (17.2)$$

получим

$$\begin{aligned} \Phi^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar) &= \sum_{|\nu|=0}^{\infty} C_\nu \Psi_\nu^{(N)}(\vec{x}, t, \hbar) + O(\hbar^{(N+1)/2}) = \\ &= \sum_{|\nu|=0}^{\infty} \widehat{R}^{(N)}(t, z_0) \int_{\mathbb{R}^n} d\vec{y} G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, 0, z_0) C_\nu |\nu, 0\rangle + O(\hbar^{(N+1)/2}) = \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} d\vec{y} G^{(N)}(\vec{x}, \vec{y}, t, 0, z_0) \varphi(\vec{y}) + O(\hbar^{(N+1)/2}), \end{aligned}$$

где

$$\widehat{R}^{(N)}(t, z_0) = \sum_{k=0}^N \left[ -\frac{i}{\hbar} \sum_{|\nu'|=0}^{\infty} |\nu', t\rangle \int_0^t dt \langle t, \nu' | \widehat{\mathcal{H}}_1(t) \right]^k \sum_{k=0}^N \left[ -\frac{i}{\hbar} \widehat{\mathcal{K}}_1(t) \right]^k, \quad (17.3)$$

а функция  $G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s, z_0)$  определена в (14.20). Следовательно,

$$G^{(N)}(\vec{x}, \vec{y}, t, 0, z_0) = \widehat{R}^{(N)}(t, z_0) G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, 0, z_0),$$

или, поскольку  $\widehat{R}^{(N)}(0, z_0) = 1$ , мы имеем для произвольного  $s$

$$G^{(N)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s, z_0) = \widehat{R}^{(N)}(t, z_0) G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s, z_0) (\widehat{R}^{(N)}(s, z_0))^+ \quad (17.4)$$

функция Грина задачи Коши



$$\begin{aligned}
[-i\hbar\partial_t + \widehat{\mathcal{H}}]G^{(N)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s, z_0) &= f^{(N)}(\vec{x}, \vec{y}, s, t, \hbar), \\
\lim_{t \rightarrow s} G^{(N)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s, z_0) &= \delta(\vec{x} - \vec{y}), \\
\left\| \int_{\mathbb{R}^n} f^{(N)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s, \hbar) \varphi(\vec{y}, s) d\vec{y} \right\|_{L_2} &= O(\hbar^{(N+3)/2})
\end{aligned} \tag{17.5}$$

для всех  $\varphi(\vec{x}, s) \in \mathcal{P}_\hbar^s$ .

Это означает, что приближенный оператор эволюции  $\widehat{U}^{(N)}$  с ядром  $G^{(N)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s)$  сходится к точному оператору эволюции  $\widehat{U}_\hbar$  на элементах пространства  $\mathcal{P}_\hbar^t$ . Для функций  $G^{(N)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s, z_0)$ , очевидно, справедливо следующее правило композиции:

$$\int_{\mathbb{R}^n} d\vec{u} G^{(N)}(\vec{x}, \vec{u}, t, \tau, z_0) G^{(N)}(\vec{u}, \vec{y}, \tau, s, z_0) = G^{(N)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s, z_0) + O(\hbar^{(N+1)/2}). \tag{17.6}$$

Обозначив через  $\widehat{U}^{(N)}(t, 0)$  приближенный оператор эволюции уравнения Шрёдингера (8.2)

$$\widehat{U}^{(N)}(t, 0)\varphi(\vec{x}) = \int d\vec{y} G^{(N)}(\vec{x}, \vec{y}, t, 0, z_0)\varphi(\vec{y}),$$

из (17.4) получим его в виде  $T$ -упорядоченного дайсоновского разложения

$$\widehat{U}^{(N)}(t, 0) = \sum_{k=0}^N \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \int_{\Delta_k^>} d^k \tau \widehat{\mathcal{H}}_1(\tau_1, t) \cdots \widehat{\mathcal{H}}_1(\tau_k, t) U_0(t, 0). \tag{17.7}$$

Здесь использованы следующие обозначения: область интегрирования – открытый гипертреугольник

$$\Delta_k^> \equiv \{\tau \in [0, t]^k \mid t > \tau_1 > \tau_2 > \dots > \tau_N > s\};$$

оператор  $\widehat{\mathcal{H}}_1(\tau, t)$  – оператор возмущения в представлении взаимодействия

$$\widehat{\mathcal{H}}_1(\tau, t) = \widehat{U}_0(t, \tau) \widehat{\mathcal{H}}_1(\tau) \widehat{U}_0^+(\tau, t), \tag{17.8}$$

где  $\widehat{\mathcal{H}}_1(t)$  был определен в (16.4), а  $\widehat{U}_0(t, s)$  – оператор эволюции квадратичного уравнения Шрёдингера с ядром  $G^{(0)}(\vec{x}, \vec{y}, t, s)$  (16.9).

◇ Заметим, что (17.7) может быть получено непосредственно из формулы Дюамеля (16.13)

$$\widehat{U}_\hbar(t, s) = \widehat{U}_0(t, s) - \frac{i}{\hbar} \int_s^t \widehat{U}_\hbar(t, \tau) \widehat{\mathcal{H}}_1(\tau) \widehat{U}_0(\tau, s) d\tau$$

методом итераций.

## 18. Квазиклассические ТКС в электромагнитных полях специального вида

### 18.1. Квазиклассические ТКС квадратичных систем

Обсудим подробнее связь квазиклассических траекторно-когерентных состояний с хорошо изученными когерентными, сжатыми и коррелированными

состояниями нерелятивистских квантовых систем, гамильтониан которых есть квадратичная форма относительно операторов координат и импульсов

Рассмотрим квантовую систему с гамильтонианом вида

$$\widehat{\mathcal{H}}(t) = \langle \hat{z}, \mathcal{B}(t)\hat{z} \rangle + \langle \hat{z}, \mathcal{C}(t) \rangle, \quad (18.1)$$

где

$$\mathcal{B}(t) = \begin{pmatrix} h_1(t) & h_2(t) \\ h_3(t) & h_4(t) \end{pmatrix}, \quad \mathcal{C}(t) = \begin{pmatrix} \vec{c}_1(t) \\ \vec{c}_2(t) \end{pmatrix}. \quad (18.2)$$

Здесь  $n \times n$  матрицы  $h_k(t)$ ,  $k = \overline{1, 3}$ , удовлетворяют условиям

$$h_1^{\text{T}}(t) = h_1(t), \quad h_2^{\text{T}}(t) = h_3(t), \quad h_4^{\text{T}}(t) = b_4(t).$$

Система Гамильтона и система в вариациях, отвечающие гамильтониану (18.1), имеют вид

$$\dot{z} = \mathcal{H}_{\text{var}}(t)z + \mathcal{J}\mathcal{C}(t), \quad z(0) = z_0, \quad (18.3)$$

$$\dot{a} = \mathcal{H}_{\text{var}}(t)a, \quad \mathcal{H}_{\text{var}}(t) = \mathcal{J}\mathcal{B}(t). \quad (18.4)$$

Пусть  $a_l(t)$ ,  $l = \overline{1, n}$ , — полный набор решений уравнения (18.4), удовлетворяющих условиям (11.2):

$$\begin{aligned} \{a_l(t), a_k(t)\} &= \{a_l^*(t), a_k^*(t)\} = 0, \\ \{a_l^*(t), a_k(t)\} &= 2id_l\delta_{lk}, \quad d_l > 0, \quad k, l = \overline{1, n}. \end{aligned} \quad (18.5)$$

Тогда решение уравнения (18.3) примет вид

$$\begin{aligned} Z(t) &= Z^{(0)}(t) + Z^{(1)}(t); \\ Z^{(1)}(t) &= \sum_{k=1}^n \frac{1}{2id_k} [a_k(t)\mathfrak{d}_k(t) - a_k^*(t)\mathfrak{d}_k^*(t)], \\ Z^{(0)}(t) &= \sum_{k=1}^n \frac{1}{2id_k} [a_k(t)\{a_k^*(0), z_0\} - a_k^*(t)\{a_k(0), z_0\}], \end{aligned} \quad (18.6)$$

где

$$\mathfrak{d}_k(t) = \int_0^t \{a_k^*(\tau), \mathcal{J}\mathcal{C}(\tau)\} d\tau.$$

Нетрудно заметить, что  $Z^{(1)}(t)$  — решение системы Гамильтона (18.3) с нулевыми начальными условиями, а  $Z^{(0)}(t)$  — решение системы в вариациях (18.4) с начальным условием  $a|_{t=0} = z_0$ .

Вакуумное траекторно-когерентное состояние определяется теперь формулами (11.5), а операторы «рождения» и «уничтожения» — соотношениями (11.4), а именно:

$$\hat{a}_j(t) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar d_j}} \{\Delta \hat{z}, a_j(t)\}. \quad (18.7)$$

Представим оператор (18.7) в виде

$$\hat{a}_j(t) = -i(\widehat{A}_j(t) - \beta_j), \quad (18.8)$$

где

$$\widehat{A}_j(t) = \frac{i}{\sqrt{2\hbar d_j}} \{\hat{z} - Z^{(1)}(t), a_j(t)\}, \quad (18.9)$$

$$\beta_j(t) = \frac{i}{\sqrt{2\hbar d_j}} \{Z^{(0)}(t), a_j(t)\} = \frac{1}{2\hbar d_j} \{z_0, a_j(0)\} = \beta_j. \quad (18.10)$$

Здесь мы учли, что  $Z^{(0)}(t)$  и  $a_j(t)$  – решения системы в вариациях, кососкалярное произведение которых не зависит от времени. Из соотношений (11.19) следует, что

$$[(-i\hbar\partial_t + \widehat{\mathcal{H}}(t), \hat{a}_j(t)]_- = 0, \quad j = \overline{1, n}, \quad (18.11)$$

и, следовательно, операторы  $\widehat{A}_j$  – точные динамические симметрии уравнения Шрёдингера с гамильтонианом (18.1):

$$[(-i\hbar\partial_t + \widehat{\mathcal{H}}(t), \widehat{A}_j(t)]_- = 0, \quad j = \overline{1, n}, \quad (18.12)$$

а условие  $\hat{a}_j(t)|0, t, z_0\rangle = 0$  (11.7) эквивалентно равенству

$$\widehat{A}_j(t)|0, t, z_0\rangle = \beta_j|0, t, z_0\rangle. \quad (18.13)$$

Соотношения (18.12) и (18.13) лежат в основе одного из возможных определений коррелированных и сжатых состояний.

Следовательно, состояние

$$|\beta, t\rangle = |0, t, z_0\rangle \Big|_{z_0=z_0(\beta)} \quad (18.14)$$

является сжатым когерентным состоянием квантовой системы (18.1). Здесь  $z_0(\beta)$  определяется соотношениями (18.10).

## 18.2. Оператор унитарной эквивалентности

Пусть даны два произвольных набора операторов  $\hat{a} = (\hat{a}^+, \vec{a})$  и  $\hat{b} = (\hat{b}^+, \vec{b})$ , связанные соотношением

$$\hat{a} = S\hat{b} \quad (18.15)$$

и удовлетворяющие одинаковым перестановочным соотношениям

$$\begin{aligned} [\hat{a}_j, \hat{a}_k^+] &= \delta_{jk}, & [\hat{a}_j, \hat{a}_k] &= [\hat{a}_j^+, \hat{a}_k^+] = 0, \\ [\hat{b}_j, \hat{b}_k^+] &= \delta_{jk}, & [\hat{b}_j, \hat{b}_k] &= [\hat{b}_j^+, \hat{b}_k^+] = 0, \end{aligned} \quad k, j = \overline{1, n}. \quad (18.16)$$

Явный вид оператора  $\widehat{M}(S)$ :

$$\hat{a}_k = \widehat{M}(S)\hat{b}_k\widehat{M}^+(S), \quad k = \overline{1, n}, \quad (18.17)$$

находим стандартным образом (см., например, [36]).

Рассмотрим стационарный эрмитов гамильтониан

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{H}} &= \frac{1}{2}(\hat{b}, G\hat{b}), & G &= \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}, \\ G_{11}^+ &= G_{11}, & G_{22}^+ &= G_{22}, & G_{12}^+ &= G_{21}, \end{aligned} \quad (18.18)$$

где  $G_{ki}$  – некоторые  $n \times n$ -матрицы. Квантовая система, описываемая уравнением Шрёдингера

$$\{-i\partial_\tau + \widehat{\mathcal{H}}\}\Psi = 0, \quad (18.19)$$

обладает интегралами движения

$$\widehat{A}_k(\tau) = \widehat{U}(\tau)\hat{b}_k\widehat{U}^+(\tau), \quad k = \overline{1, n}, \quad (18.20)$$

где  $\widehat{U}(\tau) = \exp\{i\widehat{\mathcal{H}}\tau\}$  – оператор эволюции уравнения Шрёдингера (18.19). Операторы  $\widehat{A}_k(\tau)$  (18.20) можно представить в виде

$$\widehat{A}(\tau) = \Gamma(\tau)\hat{b}, \quad (18.21)$$

где  $\Gamma(\tau)$  удовлетворяет уравнению

$$\dot{\Gamma} = -iGJ\Gamma, \quad \Gamma|_{\tau=0} = \mathbb{I}_{2n \times 2n}. \quad (18.22)$$

Следовательно,

$$\Gamma(\tau) = \exp\{-iGJ\tau\}. \quad (18.23)$$

Положив  $\widehat{A}(1) = \hat{a}$ , запишем

$$S = \exp\{-iGJ\} \quad (18.24)$$

или

$$G = -i(\ln S)J. \quad (18.25)$$

Последнее выражение корректно, поскольку матрица  $S$  невырождена и существует ее логарифм [15]. Окончательно для оператора (18.17) получим

$$\widehat{M}(S) = \exp\{-\langle \hat{b}, G\hat{b} \rangle\}. \quad (18.26)$$

### 18.3. Квазиклассические ТКС нерелятивистской заряженной частицы в постоянном и однородном магнитном поле

Рассмотрим нерелятивистскую частицу, движущуюся в постоянном и однородном магнитном поле с потенциалом вида

$$\vec{A} = \left( -\frac{Hx_2}{2}, \frac{Hx_1}{2}, 0 \right), \quad \Phi = 0, \quad H = \text{const}. \quad (18.27)$$

Приведем решения соответствующей системы Гамильтона (18.3) и системы в вариациях (18.4)

$$\begin{aligned} \vec{X}(t) &= U_1\vec{x}_0 + U_2\vec{p}_0, & \vec{P}(t) &= U_1\vec{p}_0 + U_3\vec{x}_0, \\ B(t) &= U_1B(0) + U_3C(0), & C(t) &= U_1C(0) + U_2B(0), \end{aligned} \quad (18.28)$$

где

$$\begin{aligned} U_1 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \exp(-i\sigma_2\omega t) & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}; \\ U_2 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -i\sigma_2[1 - \exp(-i\sigma_2\omega t)] & 0 \\ 0 & 0 & 2\lambda t/m \end{pmatrix}; \\ U_3 &= -\frac{i\lambda}{2} \begin{pmatrix} [1 - \exp(-i\sigma_2\omega t)]\sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \omega &= \frac{eH}{mc}, \quad \lambda = \frac{eH}{2c}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \\ B(0) &= \|b_k\delta_{kj}\|_{3 \times 3}, \quad C(0) = \|\delta_{kj}\|_{3 \times 3}, \quad \text{Im } b_k > 0. \end{aligned}$$

Вакуумные и возбужденные ТКС строятся по общей схеме (см. разд. «Квазиклассические траекторно-когерентные состояния»):

$$\begin{aligned} \Psi_0(\vec{x}, t, \hbar) &= \frac{N_\hbar}{\sqrt{J(t, z_0)}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}S(\vec{x}, t, z_0)\right\}, \\ \Psi_\nu(\vec{x}, t, \hbar) &= \Psi_0(\vec{x}, t, \hbar) \prod_{l=1}^3 \frac{1}{\sqrt{\nu_l!}} [\hat{\Lambda}_l^+(t)]^{\nu_l} \cdot 1, \end{aligned} \quad (18.29)$$

где

$$N_h = \prod_{i=1}^3 \left[ \frac{\text{Im } b_i}{(\pi \hbar)^3} \right]^{1/4}, \quad J(t, z_0) = \det C(t), \quad (18.30)$$

$$\hat{\Lambda}_l^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar \text{Im } b_l}} (\langle \vec{Z}_l^*, \hat{p} \rangle - \langle \vec{W}_l^* - Q(t)\vec{Z}_l^*, \Delta \hat{x} \rangle).$$

Здесь  $Q(t) = B(t)C^{-1}(t)$ ;  $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ ; а векторы  $\vec{Z}_l, \vec{W}_l$  ( $l = 1, 2, 3$ ) — столбцы матриц  $C(t)$  и  $B(t)$  соответственно.

Набор функций  $\Psi_\nu(\vec{x}, t, \hbar)$  (18.29) представляет полную ортонормированную систему, что проверяется непосредственным вычислением. Также легко проверить, что средние квантовомеханические  $\langle \hat{p} \rangle$  и  $\langle \hat{x} \rangle$  по  $\Psi_\nu(\vec{x}, t, \hbar)$  не зависят от номера  $\nu$  и совпадают с решениями классических уравнений движения  $\vec{X}(t, z_0)$  и  $\vec{P}(t, z_0)$ .

Отметим связь построенных квазиклассических ТКС с коррелированными когерентными состояниями (ККС) заряженной частицы в однородном магнитном поле. Для сравнения ТКС с ККС перейдем к двумерной квантовой системе, отделив в решении уравнения Шрёдингера плоскую волну

$$\Psi_\nu(\vec{x}, t, \hbar) = \Psi_\nu(x, y, t, \hbar) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (p_z^2 t / 2m + p_z z) \right\}$$

вдоль оси  $z$ . Функция  $\Psi_\nu(x, y, t, \hbar)$  является ТКС по переменным  $\vec{x}_\perp = (x, y)$  и строится по приведенным выше формулам. Вакуумное ТКС  $\Psi_0(x, y, t, \hbar)$  в этом случае зависит от четырех вещественных параметров: начальных фазовых координат  $\vec{x}_{\perp 0} = (x_0, y_0)$ ,  $\vec{p}_{\perp 0} = (p_{x0}, p_{y0})$  классической частицы — и от двух комплексных параметров  $b_i$  ( $\text{Im } b_i > 0$ ,  $i = 1, 2$ ), однозначно определяющих корреляционную матрицу операторов координат и импульсов относительно «центра тяжести» ( $\vec{x}_{\perp 0}(t, z_0), \vec{p}_{\perp 0}(t, z_0)$ ) волнового пакета  $\Psi_0(\vec{x}_\perp, t, \hbar)$ . Вакуумное ТКС  $\Psi_0(\vec{x}_\perp, t, \hbar)$  совпадает с точностью до фазового множителя

$$\exp \left\{ \frac{1}{2\hbar} \langle \vec{p}_{\perp 0}, \vec{x}_{\perp 0} \rangle \right\}$$

с ККС, если параметры  $x_{\perp 0}, p_{\perp 0}, b_1, b_2$  и параметры  $u, v, u_0, v_0, \alpha, \beta$ , определяющие ККС, связаны соотношениями

$$u = -\frac{i}{2\sqrt{a \text{Im } b_2}} (b_2 + ia), \quad u_0 = -\frac{i}{2\sqrt{a \text{Im } b_1}} (b_1 + ia),$$

$$v = \frac{i}{2\sqrt{a \text{Im } b_2}} (ia - b_2), \quad v_0 = \frac{i}{2\sqrt{a \text{Im } b_1}} (ia - b_1),$$

$$\alpha = \frac{i}{2\sqrt{a \text{Im } b_2}} \left[ (p_{y0} - x_0 a) - b_2 \left( y_0 + \frac{p_{x0}}{a} \right) \right],$$

$$\beta = \frac{i}{2\sqrt{a \text{Im } b_1}} \left[ (p_{y0} - x_0 a) - b_1 \left( y_0 + \frac{p_{x0}}{a} \right) \right], \quad a = \frac{m\omega}{2}$$

в системе единиц  $c = \hbar = 1$  при дополнительном условии  $uv_0 + vu_0 = 0$ .

Последнее ограничение несущественно и возникает в связи с тем, что в начальный момент времени матрица квадратичной по  $\vec{x}_\perp - \vec{x}_\perp(t, z_0)$  части фазы  $S(\vec{x}_\perp, t, z_0)$  волнового пакета  $\Psi_0(\vec{x}_\perp, t, \hbar)$  выбрана диагональной [см. (11.27)].

#### 18.4. Квазиклассические ТКС нерелятивистской заряженной частицы в постоянном и однородном электрическом поле

В случае постоянного однородного электрического поля с потенциалами  $\vec{\mathcal{A}} = 0$ ,  $\mathcal{A}_0 = -Ex_1$ , где  $E$  — напряженность поля, функция Гамильтона имеет вид

$$\mathcal{H}(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + Ex_1, \quad (18.31)$$

$$\vec{x} = (x_1, x_2, x_3); \quad \vec{p} = (p_1, p_2, p_3). \quad (18.32)$$

Решения системы Гамильтона (18.3) записываются следующим образом:

$$X_k(t) = \frac{Et^2}{2m}\delta_{k1} + \frac{p_{k0}t}{m} + x_{k0}, \quad P_k(t) = E\delta_{k1}t + p_{k0}, \quad k = \overline{1, 3}, \quad (18.33)$$

где  $\vec{x}_0 = (x_{10}, x_{20}, x_{30})$ ,  $\vec{p}_0 = (p_{10}, p_{20}, p_{30})$  — координаты и импульсы частицы в начальный момент времени  $t = 0$ .

Решения системы в вариациях можно построить непосредственным интегрированием системы (18.4). Однако, оказывается, проще воспользоваться соотношением (10.44), т.е. дифференцированием траекторий по начальным данным. В этом случае найдём

$$\begin{aligned} B(t) &= \text{diag}(b_1, b_2, b_3), \\ C(t) &= \text{diag}\left(\frac{b_1 t}{m} + 1, \frac{b_2 t}{m} + 1, \frac{b_3 t}{m} + 1\right). \end{aligned} \quad (18.34)$$

Тогда матрица  $Q(t) = B(t)C^{-1}(t)$  имеет следующий вид:

$$Q(t) = \text{diag}(\alpha_1(t), \alpha_2(t), \alpha_3(t)),$$

где  $\alpha_i(t) = b_i m / (b_i t + m)$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Из (11.5) и (18.34) с учетом (18.33) найдём вакуумное ТКС

$$|0, t\rangle = \Psi_0(\vec{x}, t, \hbar) = N \prod_{i=1}^3 \sqrt{\frac{\alpha_i(t)}{b_i}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(\vec{x}, t)\right], \quad (18.35)$$

где

$$S(\vec{x}, t) = -\frac{E^2 t^3}{6m} + \frac{Et^2}{2m} p_{10} - Et x_1 + \langle \vec{p}_0 \Delta \vec{x}_0 \rangle - \frac{p_{01}^2 t}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \alpha_i(t) \Delta x_i^2; \quad (18.36)$$

$$\Delta \vec{x} = \vec{x} - \vec{X}(t), \quad \Delta \vec{x}_0 = \vec{x} - x_0,$$

а  $N_{\hbar}$  определен в (18.30) и  $\text{Im } \alpha_i(t) > 0$ .

Возбужденные ТКС имеют следующий вид:

$$\Psi_{\nu}(\vec{x}, t, \hbar) = \Psi_0(\vec{x}, t, \hbar) \prod_{i=1}^3 \frac{1}{\sqrt{\nu_i!}} [\hat{\Lambda}_i^+(t)] \cdot 1, \quad (18.37)$$

где операторы  $\hat{\Lambda}_k^+$  имеют вид

$$\hat{\Lambda}_k^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar \text{Im } b_k}} \left[ \langle \vec{Z}_k^*(t), -i\hbar \nabla_x \rangle - \langle \vec{W}_k^*(t) - Q(t) \vec{Z}_k^*(t), \Delta \vec{x} \rangle \right],$$

а векторы  $\vec{W}_k$  и  $\vec{Z}_k$  — столбцы матриц  $B(t)$  и  $C(t)$  соответственно. Подставив (18.34) в последнее соотношение, получим

$$\begin{aligned}\hat{\Lambda}_k^+ &= \frac{b_k^*}{\sqrt{2\hbar \operatorname{Im} b_k}} \left\{ -\frac{i\hbar \partial_{x_k}}{\alpha_k^*(t)} - \left[ 1 - \frac{\alpha_k(t)}{\alpha_k^*(t)} \right] \Delta x_k \right\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar \operatorname{Im} b_k}} \frac{b_k^*}{\alpha_k^*(t)} [(-i\hbar \partial_{x_k}) + 2i \operatorname{Im} \alpha_k(t) \Delta x_k].\end{aligned}$$

Следовательно, оператор  $\hat{\Lambda}_k^+$  можно записать в виде

$$\hat{\Lambda}_k^+ = a_k(t) \left( \frac{\partial}{\partial \xi_k} - 2\xi_k \right),$$

где

$$a_k(t) = -\frac{ib_k^*}{\alpha_k^*(t)} \sqrt{\frac{\operatorname{Im} \alpha_k(t)}{2 \operatorname{Im} b_k}}, \quad \xi_k = \sqrt{\frac{\operatorname{Im} \alpha_k(t)}{\hbar}} \Delta x_k.$$

Последовательное применение операторов  $\hat{\Lambda}_k^+$  к единице дает

$$\prod_{j=1}^3 [\hat{\Lambda}_j^+]^{\nu_j} 1 = \prod_{j=1}^3 a_j^{\nu_j}(t) H_{\nu_j}(\xi_j),$$

где  $H_{\nu_j}(\xi_j)$  — полиномы Эрмита.

Таким образом, полный набор возбужденных ТКС нерелятивистской частицы в постоянном однородном электрическом поле имеет следующий вид:

$$\Psi_{\nu_1 \nu_2 \nu_3}(\vec{x}, t, \hbar) = \frac{a_1^{\nu_1}(t) a_2^{\nu_2}(t) a_3^{\nu_3}(t)}{\sqrt{\nu_1! \nu_2! \nu_3!}} \Psi_0(\vec{x}, t, \hbar) H_{\nu_1}(\xi_1) H_{\nu_2}(\xi_2) H_{\nu_3}(\xi_3).$$

Из результатов разд. «Квазиклассические траекторно-когерентные состояния» следует, что построенные решения являются точными, поскольку невязка для уравнения Шрёдингера в общем случае определяется смешанными производными по координатам и импульсам порядка  $k \geq 3$ , от функции Гамильтона, которые в рассматриваемом случае равны нулю.

## 19. Квазиклассическая сосредоточенность состояний и вывод классических уравнений движения из квантовой теории

Остановимся подробнее на формальной стороне вопроса – о корректном математическом выводе классических уравнений движения из квантовомеханических. Обычно ограничиваются получением уравнения Гамильтона–Якоби из уравнения Шрёдингера в некотором формальном пределе  $\hbar \rightarrow 0$  ( $\hbar$  – постоянная Планка), игнорируя тот факт, что для получения решений классических уравнений движения из уравнения Гамильтона–Якоби требуется сформулировать специальные предписания и ввести понятие фазовой траектории классической системы  $\vec{x} = \vec{X}(t)$  и  $\vec{p} = \vec{P}(t)$  уже в квантовой механике (здесь  $\vec{X}(t)$  и  $\vec{P}(t)$  – многомерные векторы с компонентами  $X_k(t)$ ,  $P_k(t)$ ,  $k = \overline{1, n}$ ).

Способ введения фазовой траектории в квантовой механике представляется достаточно очевидным. Пусть задан вектор состояния системы  $\Psi$  и набор операторов обобщенных координат  $\hat{x}$  и сопряженных им импульсов  $\hat{p}$

$$[\hat{x}_k, \hat{p}_s] = i\hbar \delta_{ks}, \quad k, s = \overline{1, n}. \quad (19.1)$$

Средние по состоянию  $\Psi$

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \Psi | \hat{x} | \Psi \rangle, \quad \langle \hat{p} \rangle = \langle \Psi | \hat{p} | \Psi \rangle \quad (19.2)$$

являются функциями времени и параметрически зависят от  $\hbar$

$$\langle \hat{x} \rangle = \vec{X}(t, \hbar), \quad \langle \hat{p} \rangle = \vec{P}(t, \hbar). \quad (19.3)$$

Если существует предел

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \vec{X}(t, \hbar) = \vec{X}(t), \quad \lim_{\hbar \rightarrow 0} \vec{P}(t, \hbar) = \vec{P}(t), \quad (19.4)$$

то естественно назвать  $\vec{x} = \vec{X}(t)$ ,  $\vec{p} = \vec{P}(t)$  фазовой траекторией классической системы, соответствующей данному состоянию  $\Psi$  (и данной квантовой теории). Очевидно, что как средние (19.3), так и предельные значения (19.4) зависят, вообще говоря, от состояния  $\Psi$ . Следовательно, требование, чтобы (19.4) являлись решением классических уравнений движения (т.е. классической системы Гамильтона), есть некоторое требование на выбор состояния  $\Psi$ .

Рассмотрим в качестве примера одномерное уравнение Шрёдингера для частицы в потенциальном поле  $U(x, t)$ . Для средних значений имеем уравнения (теорема Эренфеста)

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle p \rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\langle U_x(x, t) \rangle, \quad (19.5)$$

$$U_x(x, t) = \frac{\partial U(x, t)}{\partial x}.$$

Если бы имело место условие

$$\langle U_x(x, t) \rangle = U_{\langle x \rangle}(\langle x \rangle, t), \quad (19.6)$$

то уравнения (19.5) совпадали бы с классической системой Гамильтона. Очевидно, (19.6) всегда имеет место, если  $U(x, t)$  есть квадратичная функция  $x$  с коэффициентами, произвольно зависящими от  $t$  (например, гармонический осциллятор с произвольно зависящей от времени частотой). Во всех других случаях равенство (19.6) невозможно и, следовательно,  $X(t, \hbar)$  не является решением классической системы Гамильтона. Действительно, предположив, что  $U_x(x, t)$  разлагается в ряд Тейлора в точке  $\langle x \rangle$ :

$$U_x(x, t) = U_{\langle x \rangle}(\langle x \rangle, t) + A(\langle x \rangle)(x - \langle x \rangle) + B(\langle x \rangle)(x - \langle x \rangle)^2 + \dots,$$

где  $A(\langle x \rangle)$ ,  $B(\langle x \rangle)$  – некоторые, вообще говоря ненулевые функции  $\langle x \rangle, t$ , мы видим, что для выполнения (19.6) необходимо

$$\langle x^k \rangle = \langle x \rangle^k. \quad (19.7)$$

Уже для  $k = 2$  условие (19.7) не может быть реализовано, если, например, в  $x$ -представлении волновая функция  $\Psi = \Psi(x, t, \hbar)$  является непрерывной функцией  $x$ . Действительно, в силу свойств скалярного произведения

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle > 0, \quad \|\Psi\| = 1,$$

для любых состояний, за исключением  $|\Psi(x, t)|^2 = \delta(x - \langle x \rangle)$ . В этом состоянии  $\langle \Delta x^2 \rangle = 0$ . Но тогда волновая функция не является непрерывной. Условие (19.7) можно попытаться реализовать в пределе  $\hbar \rightarrow 0$  (для «очень узких волновых пакетов»), но тогда очевидно, что квадрат модуля  $|\Psi(x, t, \hbar)|^2$  при  $\hbar \rightarrow 0$  должен стремиться к  $\delta(x - X(t))$ . Аналогичное заключение можно сделать и для волновой функции в  $p$ -представлении  $\Psi(p, t, \hbar)$ . Такие же соображения справедливы для квантовой системы с любым (конечным) числом степеней свободы, описываемой уравнением Шрёдингера



$$\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \widehat{\mathcal{H}}(t)\right]\Psi = 0, \quad \Psi \in L_2(\mathbb{R}_x^n), \quad (19.8)$$

где самосопряженный в  $L_2(\mathbb{R}_x^n)$  оператор Гамильтона  $\widehat{\mathcal{H}}(t)$  есть функция некоммутирующих канонических переменных  $\hat{x}_k, \hat{p}_s, k, s = \overline{1, n}$ , с заданным порядком действия операторов  $\hat{x}_k, \hat{p}_s = -i\hbar\partial/\partial x_s$  (например, по Вейлю):

$$\widehat{\mathcal{H}}(t) = \mathcal{H}(\hat{p}, \hat{x}, t). \quad (19.9)$$

В связи с изложенным дадим следующее общее определение.

◆ Пусть  $z = Z(t, \hbar) = \{(\vec{P}(t, \hbar), \vec{X}(t, \hbar)), 0 \leq t \leq T\}$  – произвольная фазовая кривая в  $\mathbb{R}^{2n}$ .

Состояние  $\Psi(\vec{x}, t, \hbar)$  квантовой системы (8.2) назовем квазиклассически сосредоточенным класса

$$\mathbb{CS}_S(Z(t), N) = \mathbb{CS}_S(Z(t), N, \hbar) \quad \Psi \in \mathbb{CS}_S(Z(t), N),$$

если

1) существуют обобщенные пределы<sup>3</sup>

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} |\Psi(\vec{x}, t, \hbar)|^2 = \delta(\vec{x} - \vec{X}(t)), \quad (19.10)$$

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} |\tilde{\Psi}(\vec{p}, t, \hbar)|^2 = \delta(\vec{p} - \vec{P}(t)); \quad (19.11)$$

2) существуют квантовые моменты

$$\Delta_{\alpha, \beta}^{\text{cl}(k)}(t, \hbar) \quad 0 \leq k \leq N. \quad (19.12)$$

Здесь  $\alpha, \beta \in \mathbb{Z}_+^n$  – мультииндексы,  $|\alpha| + |\beta| = k, 0 \leq k \leq N, \Delta_{\alpha, \beta}^{\text{cl}(k)} = \langle \Psi | \hat{\Delta}_{\alpha, \beta}^{\text{cl}(k)} | \Psi \rangle, \hat{\Delta}_{\alpha, \beta}^{\text{cl}(k)}$  – оператор с вейлевским символом  $\Delta_{\alpha, \beta}^{\text{cl}(k)} = (\vec{p} - \vec{P}(t))^\alpha (\vec{x} - \vec{X}(t))^\beta$ . Напомним, что мультииндекс  $\varkappa$  – это вектор вида  $\varkappa = (\varkappa_1, \dots, \varkappa_n)$ , где  $\varkappa_j \geq 0$  – целые числа; при этом  $|\varkappa| = \sum_{j=1}^n \varkappa_j$  и для вектора  $\vec{\zeta} = (\zeta_1, \dots, \zeta_n) \in \mathbb{R}_\zeta^n$  полагаем

$$\vec{\zeta}^\varkappa = \prod_{j=1}^n \zeta_j^{\varkappa_j}, \text{ например,}$$

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}^\alpha} = \frac{\partial^{\alpha_1 + \dots + \alpha_n}}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}}.$$

Специально отметим, что векторы  $\vec{X}(t)$  и  $\vec{P}(t)$  в данном определении никак не связаны между собой и с классической фазовой траекторией системы.

Отметим простейшие свойства квазиклассически сосредоточенных состояний.

Выделив модуль и фазу, волновую функцию в  $x$ -представлении запишем в виде

$$\Psi(\vec{x}, t, \hbar) = Q(\vec{x}, t, \hbar) \exp[i\Phi(\vec{x}, t, \hbar)], \quad (19.13)$$

где  $Q(\vec{x}, t, \hbar)$  и  $\Phi(\vec{x}, t, \hbar)$  вещественны. Без ограничения общности положим

$$Q(\vec{x}, t, \hbar) = \left[ \prod_{k=1}^n a_k(\hbar) \right]^{-1/2} \rho(\vec{\xi}, t, \hbar), \quad (19.14)$$

$$\xi_k = \frac{\Delta x_k}{a_k(\hbar)}, \quad \Delta x_k = x_k - X_k(t),$$

<sup>3</sup>Под обобщенным пределом мы понимаем стандартно определяемый в теории обобщенных функций предельный переход.

$a_k(\hbar)$  – некоторые неотрицательные функции параметра  $\hbar$ . Полагая  $\Psi(\vec{x}, t, \hbar)$  нормированной на единицу, найдём

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\Psi(\vec{x}, t, \hbar)|^2 d\vec{x} = 1 \quad \Longrightarrow \quad \int_{\mathbb{R}^n} \rho^2(\vec{\xi}, t, \hbar) d\vec{\xi} = 1.$$

Формула (19.10) согласована с этим условием. Считаем, что  $a_k(\hbar)$  выбраны так, что существует конечный предел

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \rho(\vec{\xi}, t, \hbar) = \rho(\vec{\xi}, t, 0), \quad \int_{\mathbb{R}^n} \rho^2(\vec{\xi}, t, 0) d\vec{\xi} = 1, \quad (19.15)$$

тогда справедливость (19.10) обеспечивается выполнением условия

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} a_k(\hbar) = 0. \quad (19.16)$$

Аналогичные рассуждения приводят к заключению, что волновая функция в  $p$ -представлении имеет вид

$$\tilde{\Psi}(\vec{p}, t, \hbar) = \left[ \prod_{k=1}^n b_k(\hbar) \right]^{-1/2} \tilde{\rho}(\vec{\eta}, t, \hbar) \exp[-i\tilde{\Phi}(\vec{p}, t, \hbar)], \quad (19.17)$$

$$\eta_k = \Delta p_k / b_k(\hbar), \quad \Delta p_k = p_k - p_k(t),$$

где функции  $\tilde{\Phi}(\vec{p}, t, \hbar)$  и  $\tilde{\rho}(\vec{\eta}, t, \hbar)$  вещественны, а последняя нормирована условием

$$\int_{\mathbb{R}^n} \tilde{\rho}^2(\vec{\eta}, t, \hbar) d\vec{\eta} = 1,$$

и существуют пределы

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \tilde{\rho}(\vec{\eta}, t, \hbar) = \tilde{\rho}(\vec{\eta}, t, 0), \quad \lim_{\hbar \rightarrow 0} b_k(\hbar) = 0, \quad (19.18)$$

что обеспечивает выполнение (19.11). Вычисляя по функциям (19.13) и (19.17) норму операторов  $\Delta \hat{x}_k$  и  $\Delta \hat{p}_k$ , получим

$$\|\Delta x_k \Psi\| = a_k(\hbar) [\sigma_{\xi_k \xi_k}^{(2)}(t, \hbar)]^{1/2},$$

$$\sigma_{\xi_k \xi_k}^{(2)}(t, \hbar) = \int_{\mathbb{R}^n} d\vec{\xi} \xi_k^2 \rho^2(\vec{\xi}, t, \hbar), \quad (19.19)$$

$$\|\Delta p_k \tilde{\Psi}\| = b_k(\hbar) [\sigma_{\eta_k \eta_k}^{(2)}(t, \hbar)]^{1/2},$$

$$\sigma_{\eta_k \eta_k}^{(2)}(t, \hbar) = \int_{\mathbb{R}^n} d\vec{\eta} \eta_k^2 \tilde{\rho}^2(\vec{\eta}, t, \hbar). \quad (19.20)$$

Из (19.15) и (19.18) следует, что существуют конечные пределы

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \sigma_{\xi_k \xi_k}^{(2)}(t, \hbar) = \sigma_{\xi_k \xi_k}^{(2)}(t, 0), \quad \lim_{\hbar \rightarrow 0} \sigma_{\eta_k \eta_k}^{(2)}(t, \hbar) = \sigma_{\eta_k \eta_k}^{(2)}(t, 0). \quad (19.21)$$

Аналогично находим

$$\|\Delta \hat{p}_k \Psi\| = \left\{ \int_{\mathbb{R}^n} d\vec{\xi} \left| \hbar \left[ \frac{\partial \Phi(\vec{x}, t, \hbar)}{\partial x_k} - p_k(t) \right] \rho(\vec{\xi}, t, \hbar) - \frac{i\hbar}{a_k(\hbar)} \frac{\partial \rho(\vec{\xi}, t, \hbar)}{\partial \xi_k} \right|^2 \right\}^{1/2}, \quad (19.22)$$

$$\|\Delta \hat{x}_k \Psi\| = \left\{ \int_{\mathbb{R}^n} d\vec{\eta} \left| \hbar \left[ \frac{\partial \tilde{\Phi}(\vec{p}, t, \hbar)}{\partial p_k} - x_k(t) \right] \tilde{\rho}(\vec{\eta}, t, \hbar) + \frac{i\hbar}{b_k(\hbar)} \frac{\partial \tilde{\rho}(\vec{\eta}, t, \hbar)}{\partial \eta_k} \right|^2 \right\}^{1/2}. \quad (19.23)$$

Приравнявая (19.19) к (19.23) и (19.20) к (19.22), с учетом (19.21) получим, что функции  $\Phi(\vec{x}, t, \hbar)$  и  $\tilde{\Phi}(\vec{p}, t, \hbar)$  можно представить в виде

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{x}, t, \hbar) &= \Phi_0(t, \hbar) + \frac{1}{\hbar} \langle \vec{p}(t), \Delta \vec{x} \rangle + \frac{1}{\hbar} S^{(1)}(\vec{x}, t, \hbar), \\ \tilde{\Phi}(\vec{p}, t, \hbar) &= \tilde{\Phi}_0(t, \hbar) + \frac{1}{\hbar} \langle \vec{x}(t), \Delta \vec{p} \rangle + \frac{1}{\hbar} \tilde{S}^{(1)}(\vec{p}, t, \hbar), \end{aligned} \quad (19.24)$$

где функции  $\tilde{S}^{(1)}(\vec{p}, t, \hbar)$  и  $S^{(1)}(\vec{x}, t, \hbar)$  обладают свойством

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^{(1)}(\vec{x}, t, \hbar)}{\partial x_k} &= b_k(\hbar) A_k(\vec{\xi}, t, \hbar), \\ \frac{\partial \tilde{S}^{(1)}(\vec{p}, t, \hbar)}{\partial p_k} &= a_k(\hbar) \tilde{A}_k(\vec{\eta}, t, \hbar), \end{aligned} \quad (19.25)$$

$\vec{\xi}$  и  $\vec{\eta}$  определены в (19.14) и (19.17) соответственно, а функции  $A_k(\vec{\xi}, t, \hbar)$  и  $\tilde{A}_k(\vec{\eta}, t, \hbar)$  зависят от  $\hbar$  регулярно. И справедливо соотношение

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{\hbar}{a_k(\hbar) b_k(\hbar)} < \infty, \quad (19.26)$$

которое эквивалентно соотношению неопределенностей Гейзенберга. Заметим, что из (19.16) и (19.18) следует

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{\hbar}{a_k(\hbar)} = 0, \quad \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{\hbar}{b_k(\hbar)} = 0. \quad (19.27)$$

Соотношения (19.24)–(19.26) позволяют обобщить оценки (19.19), (19.20) на случай моментов произвольного порядка.

**Свойство 19.1.** На классе квазиклассически сосредоточенных состояний справедливы следующие асимптотические оценки:

$$\Delta_{\alpha, \beta}^{\text{cl}(k)} = (\vec{a}(\hbar))^\beta (\vec{b}(\hbar))^\alpha \Delta_{\vec{\eta}^\alpha, \vec{\xi}^\beta}^{\text{cl}(k)}(t, \hbar), \quad (19.28)$$

где  $\alpha, \beta$  – мультииндексы,  $\vec{a}(\hbar) = (a_1(\hbar), \dots, a_n(\hbar))$ ,  $\Delta_{\alpha, \beta}^{\text{cl}(k)}$  определено в (19.12), а функции  $\Delta_{\vec{\eta}^\alpha, \vec{\xi}^\beta}^{\text{cl}(k)}$  можно представить в виде

$$\Delta_{\vec{\eta}^\alpha, \vec{\xi}^\beta}^{\text{cl}(k)}(t, \hbar) = \int d\vec{\xi} \rho(\vec{\xi}, t, \hbar) \hat{\Delta}_{\vec{\eta}^\alpha, \vec{\xi}^\beta}^{\text{cl}(k)} \rho(\vec{\xi}, t, \hbar), \quad (19.29)$$

где  $\hat{\Delta}_{\vec{\eta}^\alpha, \vec{\xi}^\beta}^{\text{cl}(k)}$  – оператор с вейлевским символом

$$\Delta_{\vec{\eta}^\alpha, \vec{\xi}^\beta}^{\text{cl}(k)}(\vec{p}_\xi, \vec{\xi}, t, \hbar) = \prod_{k=1}^n \left[ A_k(\vec{\xi}, t, \hbar) + \frac{\hbar}{a_k(\hbar) b_k(\hbar)} p_{\xi_k} \right]^{\alpha_k} \xi_k^{\beta_k},$$

где  $p_{\xi_k}$  – компоненты вектора  $\vec{p}_\xi$  – есть импульсы, канонически сопряженные переменным  $\xi_k$ , и  $\hat{p}_{\xi_k} = -i\partial/\partial\xi_k$ .

**Доказательство** непосредственно следует из явного вида функции  $\Psi(\vec{x}, t, \hbar)$  (19.13), (19.14) и (19.24) после коммутации оператора  $\Delta_{\alpha, \beta}^{\text{cl}(k)}$  с экспонентой  $\exp[i\Phi(\vec{x}, t, \hbar)]$  и последующей замены переменных  $\vec{x}$  на  $\vec{\xi}$  (19.14).

◇ Из явного вида квазиклассически сосредоточенных состояний (19.13), (19.14), (19.17), (19.24) следует, что для средних значений квантовых наблюдаемых  $\widehat{A}(t, \hbar)$ , символ которых  $A(\vec{p}, \vec{x}, t, \hbar)$  регулярно зависит от  $\hbar$  и удовлетворяет предположению 1, справедливо

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle \Phi | \widehat{A}(t, \hbar) | \Psi \rangle = A(\vec{P}(t), \vec{X}(t), t, 0) \lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle \Phi | \Psi \rangle,$$

$$\Psi, \Phi \in \mathbb{CS}_S(Z(t), N), \quad N \geq 2.$$

Сформулируем теорему о квазиклассически сосредоточенных состояниях и дадим ее доказательство для многомерного уравнения Шрёдингера.

**Теорема 19.1.** *Если состояние  $\Psi(t)$  – квазиклассически сосредоточенное класса  $\mathbb{CS}_S(Z(t), N)$ ,  $N \geq 2$ , то  $\vec{X}(t)$  и  $\vec{P}(t)$  являются решениями соответствующей классической системы Гамильтона.*

Иными словами, получить квазиклассическую сосредоточенность на фазовых кривых, не являющихся классическими траекториями данной системы, невозможно.

**Доказательство.** Рассмотрим многомерное уравнение Шрёдингера (8.2), в котором вейлевский символ оператора Гамильтона  $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{x}, t, \hbar)$  дифференцируем по переменным  $\vec{x}$ ,  $\vec{p}$  и имеет предел

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \mathcal{H}(\vec{p}, \vec{x}, t, \hbar) = \mathcal{H}(\vec{p}, \vec{x}, t), \quad (19.30)$$

где  $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{x}, t)$  – классический гамильтониан, соответствующий данной квантовой системе.

Найдем среднее значение оператора  $-i\hbar\partial_t + \widehat{\mathcal{H}}(t)$  по состояниям (19.13), считая, что они удовлетворяют уравнению (8.2). Это среднее в силу (8.2) есть тождественный нуль. С другой стороны, в низших порядках по  $\hbar$ , используя формулу (19.29), можно получить

$$0 \equiv \hbar \frac{d\Phi_0(t, \hbar)}{dt} + \mathcal{H}(t) - \sum_{k=1}^n P_k(t) \dot{X}_k(t) + \sum_{k=1}^n a_k(\hbar) \sigma_{\xi_k}^{\text{cl}(1)}(t) [\mathcal{H}_{x_k}(t) + \dot{P}_k(t)] +$$

$$+ \sum_{k=1}^n b_k(\hbar) \sigma_{\eta_k}^{\text{cl}(1)}(t, \hbar) [\mathcal{H}_{p_k}(t) - \dot{X}_k(t)] + \dots$$

Отсюда немедленно следует необходимость выполнения равенств

$$\frac{dS(t)}{dt} + \mathcal{H}(t) - \langle \vec{P}(t), \dot{\vec{X}}(t) \rangle = 0, \quad S(t) = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar \Phi_0(t, \hbar); \quad (19.31)$$

$$\dot{\vec{p}} + \mathcal{H}_{\vec{x}}(\vec{p}, \vec{x}, t) = 0, \quad \dot{\vec{x}} - \mathcal{H}_{\vec{p}}(\vec{p}, \vec{x}, t) = 0. \quad (19.32)$$

Уравнение (19.31) связывает классическое действие с гамильтонианом, а уравнения (19.32) являются классической системой Гамильтона. Тем самым теорема доказана.

◇ Нетрудно убедиться, что доказательство не изменится, если вместо точных решений уравнения Шрёдингера (19.27) использовать приближенные или, что эквивалентно, уравнение (19.27) заменить приближенным уравнением (см. [40] и цитируемую там литературу)

$$(-i\hbar\partial_t + \widehat{\mathcal{H}}(t))\Psi = O(\hbar). \quad (19.33)$$

**Теорема 19.2.** Если матрицы  $\mathcal{H}_{pp}(t)$  и  $\mathcal{H}_{xx}(t)$  невырождены, а состояние  $\Psi$  квазиклассически сосредоточено, то при  $t \in [0, T]$ ,  $T < \infty$ , за исключением, может быть, конечного числа точек  $t_j$ , справедливы следующие асимптотические оценки:

$$\|\Delta x_k \Psi(\vec{x}, t, \hbar)\| \sim \|\Delta \hat{p}_k \Psi(\vec{x}, t, \hbar)\|, \quad k = \overline{1, n}, \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (19.34)$$

**Доказательство.** Пусть для определенности

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} b_k(\hbar)/a_k(\hbar) = 0, \quad k = \overline{1, n}. \quad (19.35)$$

Если условие (19.35) не выполняется, то по  $k$ -ой координате перейдем в  $p$ -представление. Тогда в новых координатах

$$\begin{aligned} \vec{y} &= (x_1, \dots, x_{k-1}, p_k, x_{k+1}, \dots, x_n), \\ \vec{p}_y &= (p_1, \dots, p_{k-1}, -x_k, p_{k+1}, \dots, p_n) \end{aligned}$$

соотношение (19.35) будет выполняться. Поскольку функции  $\Psi(\vec{x}, t, \hbar)$  (19.13) – точное решение уравнения (8.2), то при подстановке  $\Psi(\vec{x}, t, \hbar)$  в это уравнение мы должны получить тождественный нуль во всех порядках по  $\hbar$ . С учетом оценок (19.28) получим

$$\begin{aligned} &\left\{ -i\hbar \partial_t + \mathcal{H}(t) + \langle \mathcal{H}_{\vec{p}}, \Delta \hat{p} \rangle + \langle \mathcal{H}_{\vec{x}}, \Delta \vec{x} \rangle + R_\alpha(\Delta \vec{x}, t) + \right. \\ &\left. + \frac{1}{2} \langle \Delta \hat{p}, \mathcal{H}_{px} \Delta \vec{x} \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta \vec{x}, \mathcal{H}_{xp} \Delta \hat{p} \rangle \right\} \Psi + O(c(\hbar)) = 0, \end{aligned} \quad (19.36)$$

где

$$R_\alpha(\Delta \vec{x}, t) = \sum_{|\mu|=2}^{\alpha} \frac{1}{\mu!} \frac{\partial^{|\mu|} \mathcal{H}(t)}{\partial \vec{x}^\mu} \Delta \vec{x}^\mu, \quad (19.37)$$

$\alpha$  – мультииндекс, который определяется из условия

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar / (a_k(\hbar))^{\alpha_k} = 0, \quad \lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar / (a_k(\hbar))^{\alpha_k + 1} = \infty,$$

а

$$c(\hbar) = \max\{(a_1(\hbar))^{\alpha_1 + 1}, \dots, (a_n(\hbar))^{\alpha_n + 1}, (b_1(\hbar))^2, \dots, (b_n(\hbar))^2\}. \quad (19.38)$$

Заметим, что  $\lim_{\hbar \rightarrow 0} c(\hbar)/\hbar = 0$ .

Подставим (19.13) в (19.36) и приравняем к нулю действительную и мнимую части уравнения (19.36). Получим

$$\left\{ \hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \hbar \langle \dot{X}(t), \nabla \Phi \rangle + \hbar \langle \Delta \vec{x}, \mathcal{H}_{xp}(t) \nabla \Phi \rangle + R_\alpha(\Delta \vec{x}, t) + O(c(\hbar)) \right\} \rho = 0, \quad (19.39)$$

$$-i\hbar \left[ \partial_t - \langle \dot{X}(t), \nabla \rangle + \langle \Delta \vec{x}, \mathcal{H}_{xp}(t) \nabla \rangle + \frac{1}{2} \text{Sp } \mathcal{H}_{xp}(t) \right] \rho = O(c(\hbar)). \quad (19.40)$$

Уравнение (19.39) – линейное неоднородное уравнение первого порядка в частных производных. Из структуры  $R_\alpha(\Delta \vec{x}, t)$  следует, что частное решение неоднородного уравнения можно искать в виде

$$\Phi_{\text{неод}}(\vec{x}, t, \hbar) = \frac{1}{\hbar} \sum_{|\mu|=2}^{\alpha} \frac{1}{\mu!} D_\mu^{(k)}(t, \hbar) (\Delta \vec{x})^\mu, \quad k = |\mu|. \quad (19.41)$$

В частности, для матрицы  $D^{(2)}(t)$  получим уравнение

$$\dot{D}^{(2)} + \mathcal{H}_{xp}(t)D^{(2)} + D^{(2)}\mathcal{H}_{px}(t) + \mathcal{H}_{xx}(t) = 0. \quad (19.42)$$

Матрица  $D^{(2)}(t)$  невырождена (за исключением, может быть, конечного числа точек  $t_j \in [0, T]$ ), так как невырождена матрица  $\mathcal{H}_{xx}(t)$ . Действительно, общее решение уравнения (19.42) имеет вид

$$D^{(2)}(t) = U(t)D_0U^\top(t) + \int_0^t d\tau U(t)U^{-1}(\tau)\mathcal{H}_{xx}(\tau)(U^\top(\tau))^{-1}U^\top(t),$$

где  $U(t)$  – решение задачи Коши

$$\dot{U} = -\mathcal{H}_{xp}(t)U, \quad U(0) = \mathbb{I}_{n \times n};$$

$D_0$  – произвольная постоянная  $n \times n$  матрица.

Следовательно,

$$\Phi(\vec{\xi}, t, \hbar) = \Phi_{\text{од}}(\vec{\xi}, t, \hbar) + \frac{1}{2\hbar} \langle \Delta \vec{x}, D^{(2)}(t) \Delta \vec{x} \rangle + \sum_{|\mu|=3}^{\alpha} \frac{1}{\mu!} D_{\mu}^{(k)}(t) (\Delta \vec{x})^{\mu}. \quad (19.43)$$

Вычислив норму оператора  $\Delta \hat{p}_k$  по функциям (19.13) и (19.43), получим, что при  $t > 0$  ( $D^{(2)}(0) = 0$ )  $\|\Delta \hat{p}_k\| \approx \|\Delta x_k\|$ , что и требовалось доказать.

Проиллюстрируем утверждение теоремы на двух примерах.

**Пример 19.1.** Рассмотрим движение свободной частицы с гамильтонианом

$$\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{x}) = \vec{p}^2/2m. \quad (19.44)$$

В этом случае удобно воспользоваться не явным видом волновой функции, а уравнениями для матриц дисперсии  $\sigma_{xx}$  и  $\sigma_{pp}$ . После несложных вычислений уравнения Эренфеста для матриц  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{pp}$  и  $\sigma_{px}$  примут вид

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{xx} &= \mathcal{H}_{pp}\sigma_{px} + \sigma_{xp}\mathcal{H}_{pp}, & \sigma_{pp}(0) &= \sigma_{pp}^0, \\ \dot{\sigma}_{xp} &= \mathcal{H}_{pp}\sigma_{pp}, & \sigma_{px}(0) &= \sigma_{px}^0, \\ \dot{\sigma}_{pp} &= 0, & \sigma_{xx}(0) &= \sigma_{xx}^0, \end{aligned} \quad (19.45)$$

где  $\mathcal{H}_{pp} = \frac{1}{m} \|\delta_{ij}\|_{n \times n}$ . Система уравнений (19.45) легко интегрируется:

$$\begin{aligned} \sigma_{pp}(t) &= \sigma_{pp}^0, & \sigma_{xp}(t) &= \frac{1}{m} \sigma_{pp}^0 t + \sigma_{xp}^0, \\ \sigma_{xx}(t) &= \frac{1}{m^2} \sigma_{pp}^0 t^2 + \frac{2}{m} \sigma_{px}^0 t + \sigma_{xx}^0. \end{aligned} \quad (19.46)$$

Из соотношений (19.46) следует, что если при  $t = 0$

$$\begin{aligned} \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{\|\Delta x_k \Psi\|}{\|\Delta p_k \Psi\|} \Big|_{t=0} &= 1, \\ \|\Delta x_k \Psi\| &= \sqrt{\sigma_{x_k x_k}(t, \hbar)}, \quad \|\Delta p_k \Psi\| = \sqrt{\sigma_{p_k p_k}(t, \hbar)}, \end{aligned} \quad (19.47)$$

то с учетом соотношения неопределенностей Шрёдингера–Робертсона [45] при  $t = 1$  получим

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{\|\Delta x_k \Psi\|}{\|\Delta p_k \Psi\|} \Big|_{t=1} = 1. \quad (19.48)$$

Однако, если предел  $\lim_{\hbar \rightarrow 0} \|\Delta p_k \Psi\| / \|\Delta x_k \Psi\| = 0$  для  $t = 0$ , то, как следует из (19.46), он равен нулю для всех  $t$ . Следовательно, (19.48) не выполняется. Полученный результат не противоречит (19.34), поскольку в рассматриваемом примере условия теоремы 19.2 не выполнены.

**Пример 19.2.** Рассмотрим одномерный гармонический осциллятор с постоянной частотой:

$$\mathcal{H}(p, x) = \frac{p^2}{2} + \frac{\omega^2}{2}x^2. \quad (19.49)$$

Тогда для определения дисперсий  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{pp}$  и  $\sigma_{xp} = \sigma_{px}$  получим систему уравнений

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{pp} &= -2\mathcal{H}_{xx}\sigma_{xp} - 2\mathcal{H}_{xp}\sigma_{pp}, \\ \dot{\sigma}_{xp} &= \mathcal{H}_{pp}\sigma_{pp} - \mathcal{H}_{xx}\sigma_{xx}, \\ \dot{\sigma}_{xx} &= 2\mathcal{H}_{pp}\sigma_{xp} + 2\mathcal{H}_{px}\sigma_{xx}, \\ \sigma_{pp}(0) &= \sigma_{pp}^0, \quad \sigma_{px}(0) = \sigma_{px}^0, \quad \sigma_{xx}(0) = \sigma_{xx}^0, \end{aligned} \quad (19.50)$$

где  $\mathcal{H}_{pp} = 1$ ,  $\mathcal{H}_{px} = 0$ ,  $\mathcal{H}_{xx} = \omega^2$ . Система уравнений (19.50) легко интегрируется:

$$\begin{aligned} \sigma_{pp}(t) &= \sigma_{pp}^0 \cos^2 \omega t - \omega \sigma_{xp}^0 \sin 2\omega t + \omega^2 \sigma_{xx}^0 \sin^2 \omega t; \\ \sigma_{xp}(t) &= \sigma_{xp}^0 \cos 2\omega t + \frac{1}{2\omega} \sigma_{pp}^0 \sin 2\omega t - \frac{\omega}{2} \sigma_{xx}^0 \sin^2 \omega t; \\ \sigma_{xx}(t) &= \sigma_{xx}^0 \cos^2 \omega t + \frac{1}{\omega} \sigma_{xp}^0 \sin 2\omega t + \frac{1}{\omega^2} \sigma_{pp}^0 \sin^2 \omega t. \end{aligned} \quad (19.51)$$

Таким образом, за исключением счетного числа точек  $t_j = Tj/4$ ,  $j \in \mathbb{Z}$ ,  $T = 2\pi/\omega$ , при  $\hbar \rightarrow 0$  справедливо

$$\|\Delta x \Psi\| = \sqrt{\sigma_{xx}(t)} \sim \|\Delta \hat{p} \Psi\| = \sqrt{\sigma_{pp}(t)}. \quad (19.52)$$

◇ Из вышесказанного следует:

1) в подавляющем большинстве ситуаций можно считать, что условия теоремы 19.1 выполнены;

2) «Наиболее классическими» следует считать состояния, для которых (19.26) имеет вид

$$\|\Delta x_k \Psi\| \cdot \|\Delta \hat{p}_k \Psi\| \sim \hbar \quad k = \overline{1, n}; \quad (19.53)$$

3) если справедливо (19.53), то асимптотические оценки (19.34) верны вне зависимости от условий теоремы 19.2.

Поэтому всюду в дальнейшем (если не оговорено противное) будем считать, что

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{\|\Delta x_k \Psi\|}{\sqrt{\hbar}} = a_k^0, \quad \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{\|\Delta \hat{p}_k \Psi\|}{\sqrt{\hbar}} = b_k^0, \quad (19.54)$$

где  $a_k^0, b_k^0$  – положительные размерные числа.

В заключение рассмотрим некоторые следствия теоремы о квазиклассически сосредоточенных состояниях.

Наиболее общим в настоящее время методом построения приближенных квазиклассических решений уравнений квантовой теории является метод канонического оператора Маслова (или его простейший вариант – метод комплексного роста). При использовании этого метода предполагается, что соответствующие классические уравнения движения и их решения известны. Доказанные теоремы свидетельствуют, что такое предположение излишне и классические уравнения движения «порождаются» в процессе построения (приближенных) решений, сосредоточенных в окрестности классических траекторий. Это может оказаться существенным в тех случаях, когда квантовая механика получена не квантованием соответствующей (уже известной) классической теории, а каким-либо иным методом (как, например, механика, описываемая уравнением Дирака с внешними калибровочными полями). Тогда метод канонического оператора (или метод комплексного роста) может рассматриваться как способ отыскания классических уравнений, соответствующих данной квантовой теории. Весьма

важным нам представляется то обстоятельство, что теперь в качестве набора «классических величин» можно выбрать и такие, которые не имеют прямого классического аналога (спин, например, или изоспин). Однако, если удастся разумно определить квазиклассическую сосредоточенность на таких величинах и получить замкнутую относительно всех рассматриваемых «классических величин» систему обыкновенных дифференциальных уравнений в пределе  $\hbar \rightarrow 0$ , то естественно именно эту систему объявить классической теорией, соответствующей данной квантовой теории.

Таким образом, корректный формальный переход от квантовой теории к классической требует наложения определенных ограничений на квантовые состояния (их квазиклассической сосредоточенности). Состояния, не удовлетворяющие этим ограничениям, являются «существенно квантовыми», удовлетворяющие им – «близкими к классическим». Нетрудно убедиться, что известные когерентные (и сжатые когерентные) состояния удовлетворяют условию квазиклассической сосредоточенности, но, возможно, класс таких состояний может быть расширен.

Если существует среднее значение по квазиклассически сосредоточенным состояниям от произвольного оператора  $A(\hat{p}, \hat{x}, t)$ , то существует классический предел

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle A(\hat{p}, \hat{x}, t) \rangle = A(t), \quad (19.55)$$

причем для величины  $A(t)$  справедлива классическая связь производной по времени со скобкой Пуассона.

Наконец, весьма важен вопрос о существовании квазиклассически сосредоточенных состояний. Этот вопрос мы рассмотрим ниже.

## 20. Уравнения Гамильтона–Эренфеста для квантовых средних

Рассмотренные в предыдущем разделе траекторно-сосредоточенные функции уравнения Шрёдингера позволяют строго обосновать новый подход к квазиклассическому приближению, состоящий (в любом порядке по  $\hbar$ ,  $\hbar \rightarrow 0$ ) в замене дифференциального уравнения в частных производных конечной системой обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Эту систему мы будем называть системой Гамильтона–Эренфеста или  $M$ -системой (см. [40] и цитируемую там литературу).

### 20.1. Система Гамильтона–Эренфеста для упорядоченных по Вейлю операторов

**Теорема 20.1.** *Для любого  $\Psi|_{t=0} = \Psi_0 \in \mathcal{P}_\hbar^0$  уравнение Шрёдингера (8.2) эквивалентно (с любой степенью точности по  $\sqrt{\hbar}$ ,  $\hbar \rightarrow 0$ ) конечной замкнутой системе обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка на конечном временном интервале  $[0, T]$ .*

**Доказательство.** 1. Действительно, согласно оценкам (8.7), для средних  $A(t, \hbar) = \langle \hat{A}(t) \rangle$  произвольного оператора  $\hat{A}(t)$  по состоянию  $\Psi(\vec{x}, t, \hbar)$  такому, что  $\Psi(\vec{x}, 0, \hbar) \in \mathcal{P}_\hbar^t$ , справедливо

$$A(t, \hbar) = \sum_{|\mu|=0}^N A_\mu(t, \hbar) \Delta_\mu(t, \hbar) + O(\hbar^{(N+1)/2}); \quad (20.1)$$

$$A_\mu(t, \hbar) = \frac{1}{\mu!} \left. \frac{\partial^{|\mu|} A(z, t, \hbar)}{\partial z^\mu} \right|_{z=Z(t, \hbar)}.$$



Тем самым достаточно найти средние  $\langle z \rangle$ ,  $\Delta_\mu(t, \hbar)$ , чтобы по формуле (20.1) определить средние любого оператора<sup>4</sup>, задаваемого символом  $A(z, t, \hbar)$ . Средние  $\Delta_\mu(t, \hbar)$  будем называть *моментами* (*центрированными моментами*) порядка  $k = |\mu|$ .

2. Средние значения всякого оператора  $\hat{A}$  удовлетворяют уравнению (теорема Эренфеста [23])

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{\langle \partial \hat{A} \rangle}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}] \rangle. \quad (20.2)$$

Пользуясь правилами композиции вейлевских символов (см. [5]), для символа оператора  $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$  запишем

$$C(z) = A\left(\frac{z}{2} + \frac{i\hbar}{2}J\frac{\partial}{\partial z}\right)B(z) = B\left(\frac{z}{2} - \frac{i\hbar}{2}J\frac{\partial}{\partial z}\right)A(z), \quad (20.3)$$

откуда после громоздких, но несложных расчетов получим следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{z} &= \sum_{|\mu|=0}^N \frac{1}{\mu!} J \mathcal{H}_{z\mu}(z, t) \Delta_\mu, \\ \dot{\Delta}_\alpha &= \sum_{|\mu+\gamma|=0}^N \left(-i\hbar\right)^{|\gamma|-1} \frac{[(-1)^{|\gamma p|} - (-1)^{|\gamma x|}] \alpha! \beta!}{\gamma! (\alpha - \gamma)!} \times \\ &\times \frac{\theta(\alpha - \gamma) \theta(\beta - \gamma)}{(\beta - \gamma)! \mu!} \mathcal{H}_\mu(z, t) \Delta_{\alpha - \mu + J\beta - J\gamma} - \sum_{k=1}^{2n} \dot{z}_k \alpha_k \Delta_{\alpha(k)} \end{aligned} \quad (20.4)$$

с начальными условиями

$$\begin{aligned} z|_{t=0} &= z_0 = \langle \Psi_0 | \hat{z} | \Psi_0 \rangle, & \Delta_\alpha|_{t=0} &= \langle \Psi_0 | \{ \hat{z} - z_0 \}^\alpha | \Psi_0 \rangle, \\ \alpha &\in \mathbb{Z}_+^{2n}, & |\alpha| &\leq N. \end{aligned} \quad (20.5)$$

Здесь обозначено

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_\mu(z, t) &= \frac{\partial^{|\mu|} \mathcal{H}(z, t)}{\partial z^\mu}, & \theta(\alpha - \beta) &= \prod_{k=1}^{2n} \theta(\alpha_k - \beta_k), \\ \mathcal{H}_{z\mu}(t, \hbar) &= \partial_z \mathcal{H}_\mu(t, \hbar), & \alpha &= (\alpha_p, \alpha_x), \\ J\alpha &= (\alpha_x, \alpha_p), & \alpha(k) &= (\alpha_1 - \delta_{1,k}, \dots, \alpha_{2n} - \delta_{2n,k}). \end{aligned} \quad (20.6)$$

Таким образом, теорема доказана.

◆ Система уравнений (20.4) называется системой *Гамильтона–Эренфеста* порядка  $N$ .

Отметим, что волновую функцию можно исключить и из начальных условий для системы (20.4), если они будут удовлетворять бесконечной системе неравенств<sup>5</sup> (обобщенных соотношений неопределенности Гейзенберга) и при  $t = 0$  удовлетворять оценкам (8.7). Очевидно, что все неравенства Гейзенберга совместны с уравнениями (20.4).

<sup>4</sup>Последнее утверждение представляется естественным, поскольку хорошо известно, что плотность распределения полностью определяет центрированные моменты, а они, в свою очередь (при условиях типа условий Карлемана), — плотность распределения [46]. Соотношения (20.1) означают, что мы перешли к описанию квантовой системы с помощью моментов  $\langle z \rangle$ ,  $\Delta_\mu(t, \hbar)$ , а не волновой функции  $\Psi(\vec{x}, t, \hbar)$ .

<sup>5</sup>Для  $|\alpha + \beta| \leq 4$  система неравенств хорошо изучена.

Система (20.4) представляет собой конечную систему обыкновенных дифференциальных уравнений относительно величин  $\langle z \rangle$ ,  $\Delta_\alpha$  и с точностью до  $O(\hbar^{(N+1)/2})$  эквивалентна уравнению Шрёдингера (8.2).

Достаточно очевидно, что всегда можно создать механическую систему с конечным числом степеней свободы, которая будет точно описываться системой (20.4). Тем самым приближенное квазиклассическое описание с точностью  $O(\hbar^{(N+1)/2})$  допускает точную механическую аналогию, причем число степеней свободы такой системы растет с ростом  $N$ . Изучение этой аналогии средствами классической механики может представлять самостоятельный интерес.

## 20.2. Система Гамильтона–Эренфеста, не содержащая постоянную Планка

Систему уравнений (20.4) можно записать в форме, не содержащей в явном виде постоянную Планка  $\hbar$ . Рассмотрим следующий способ упорядочения операторов:

$$\widehat{A}(t) = \widehat{A}^{(\infty)}(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} A_a^{(k)}(t, \hbar) \widehat{\Delta}_a^{(k)}, \quad (20.7)$$

где

$$A_a^{(k)}(z, t) = \frac{\partial^k A(z, t)}{\partial z^{a_1} \dots \partial z^{a_k}}, \quad A_a^{(k)}(t) = A_a^{(k)}(z, t) \Big|_{z=Z(t, \hbar)},$$

а  $\Delta_a^k$  – оператор вида

$$\widehat{\Delta}_a^{(k)} = \widehat{\Delta}_{a_1, a_2, \dots, a_k}^{(k)} = \Delta_{\widehat{z}_{a_1}} \Delta_{\widehat{z}_{a_2}} \dots \Delta_{\widehat{z}_{a_k}}, \quad (20.8)$$

где

$$\Delta_{\widehat{z}} = \widehat{z} - Z(t, \hbar), \quad a_l = \overline{1, 2n}, \quad l = \overline{1, k}.$$

Для операторов  $\widehat{\Delta}_a^{(k)}$  справедливо следующее правило композиции:

$$\widehat{\Delta}_a^{(k)} \widehat{\Delta}_b^{(l)} = \widehat{\Delta}_{a \cdot b}^{(k+l)}, \quad a \cdot b = (a_1, \dots, a_k, b_1, \dots, b_l). \quad (20.9)$$

Оператор Гамильтона (8.2) можно представить в виде

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_{k=0}^N \frac{1}{k!} \frac{\partial^k \mathcal{H}(z, t)}{\partial z^{a_1} \dots \partial z^{a_k}} \widehat{\Delta}_{a_1 \dots a_k}^{(k)} + \widehat{O}(\hbar^{(N+1)/2}), \quad z = (\langle \vec{p} \rangle, \langle \vec{x} \rangle),$$

где оценка понимается в смысле (8.7), а по повторяющимся индексам подразумевается суммирование.

С учетом

$$[\widehat{z}_{a_0}, \widehat{z}_{b_0}]_- = i\hbar J_{a_0 b_0}, \quad a_0, b_0 = \overline{1, 2n}, \quad (20.10)$$

где  $J = \|J_{a_0 b_0}\|$  – единичная симплектическая матрица, получим следующие соотношения для коммутаторов:

$$\begin{aligned} \left[ \widehat{\Delta}_a^{(k)}, \widehat{z}_{a_0} \right]_- &= i\hbar \sum_{l=1}^k J_{a_l a_0} \widehat{\Delta}_{(a_l)}^{(k-1)}, \\ \left[ \widehat{\Delta}_a^{(k)}, \widehat{\Delta}_b^{(l)} \right]_- &= i\hbar \sum_{m=1}^k \sum_{n=1}^l J_{a_m b_n} \Delta_{(a)_m ((b)_n)}^{(k+l-2)} = i\hbar \sum_{m=1}^k \sum_{n=1}^l J_{a_m b_n} \Delta_{(b)_n ((a)_m)}^{(k+l-2)}. \end{aligned} \quad (20.11)$$

Здесь мы использовали следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \langle a \rangle_m &= (a_1, a_2, \dots, a_{m-1}, a_{m+1}, \dots, a_k), \\ \langle a \rangle_m \langle (b)_n \rangle &= (a_1, a_2, \dots, a_{m-1}, b_1, b_2, \dots, b_{n-1}, b_{n+1}, \dots, b_l, a_{m+1}, \dots, a_k). \end{aligned} \quad (20.12)$$

Подставив (20.11) и (20.8) в (20.2), получим следующие уравнения:

$$\begin{aligned} \dot{z}_{b_0} &= J_{b_0 a_0} \sum_{k=1}^N \frac{1}{k!} \mathcal{H}_{a_0 \cdot a}^{(k+1)} \Delta_a^{(k)}, \quad z = \langle z \rangle, \\ \dot{\Delta}_b^{(l)} &= - \sum_{k=1}^N \sum_{m=1}^k \sum_{n=1}^l \frac{1}{k!} \mathcal{H}_a^{(k)} J_{a_m b_n} \Delta_{(a)_m ((b)_n)}^{(k+l-2)} - \sum_{n=1}^l \dot{z}_{b_n} \Delta_{(b)_n}^{(l-1)}. \end{aligned} \quad (20.13)$$

Полученная система (20.13) не содержит постоянную Планка  $\hbar$  в явном виде (в отличие от системы (20.4)). Однако система (20.13) – система со связями, которые следуют непосредственно из (20.8)–(20.10):

$$\Delta_{(a)_m (a_0 \cdot b_0)}^{(l)} - \Delta_{(a)_m (b_0 \cdot a_0)}^{(l)} = i\hbar J_{a_0 b_0} \Delta_{(a)_m}^{(l-2)} \quad (20.14)$$

для произвольных  $l, m \in \mathbb{Z}_+$ .

Для системы (20.13) соотношение неопределенностей эквивалентно следующему условию [45]: полилинейная форма

$$w(\vec{u}^1, \dots, \vec{u}^k, \vec{v}^1, \dots, \vec{v}^k) = \Delta_{a \cdot b}^{(2k)} u_{a_1}^k, \dots, u_{a_k}^1, v_{b_1}^1, \dots, v_{b_k}^k \quad (20.15)$$

положительно определена, а именно: для произвольного набора из  $k$  векторов  $\vec{u}^l = \{u_{a_j}^l\}$ ,  $l = 1, k$ , справедливо соотношение

$$\Delta_{a_1, \dots, a_k, b_1, \dots, b_k}^{(2k)} u_{a_1}^k, \dots, u_{a_k}^1, u_{b_1}^1, \dots, u_{b_k}^k \geq 0, \quad (20.16)$$

которое следует непосредственно из

$$w(\vec{u}^1, \dots, \vec{u}^k, \vec{u}^1, \dots, \vec{u}^k) = \int d^n x |\Delta \hat{z}_{a_1} u_{a_1}^1 \cdots \Delta \hat{z}_{a_k} u_{a_k}^k \Psi|^2 \geq 0. \quad (20.17)$$

Таким образом, система (20.13) со связями (20.14) при условии (20.16) полностью эквивалентна уравнению Шрёдингера (8.2) ( $\text{mod } \hbar^{(N+1)/2}$ ) в смысле вычисления квантовых средних.

В заключение приведем явный вид системы (20.16) для  $N = 2$ :

$$\begin{aligned} \dot{z} &= J \partial_z \mathcal{H}(z, t) + \frac{1}{2} \langle \partial_z, \Delta_2 \partial_z \rangle J \partial_z \mathcal{H}(z, t), \\ \dot{\Delta}_2 &= J \mathcal{H}_{zz}''(z, t) \Delta_2 - \Delta_2 \mathcal{H}_{zz}''(z, t) J, \\ \Delta_2^\Gamma &= \Delta_2 + i\hbar J, \end{aligned} \quad (20.18)$$

где  $\Delta_2 = \|\Delta_{a_1 a_2}\|_{2n \times 2n}$  – неотрицательно определенная матрица;  $\Delta_2^\Gamma$  – матрица, транспонированная матрице  $\Delta_2$ . Для практических расчетов иногда оказывается удобным использовать следующую форму системы (20.18):

$$\begin{aligned} \dot{z} &= J \partial_z \mathcal{H}(z, t) + \frac{1}{2} \langle \partial_z, A \Delta_2^0 A^+ \partial_z \rangle J \partial_z \mathcal{H}(z, t), \\ \dot{A} &= J \mathcal{H}_{zz}''(z, t) A, \\ A(0) &= \begin{pmatrix} B_0 & B_0^* \\ C_0 & C_0^* \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (20.19)$$

постоянная матрица  $\Delta_2^0$  положительно определена и удовлетворяет условию  $(\Delta_2^0)^\Gamma = \Delta_2^0 + i\hbar J$ .

### 20.3. Система Гамильтона–Эренфеста: приближение малых дисперсий

В силу оценок (8.7) систему Гамильтона–Эренфеста можно решать не точно, а приближенно:

$$\begin{aligned} z(t) &= z_0(t) + \hbar z_1(t) + O(\hbar^2), \\ \Delta_2(t) &= \Delta_2^0(t) + O(\hbar^2). \end{aligned} \quad (20.20)$$

Подставив (20.20) в систему (20.18), с точностью до  $O(\hbar^{3/2})$  получим систему уравнений для  $z_0, z_1, \Delta_2$

$$\begin{aligned} \dot{z}_0 &= J\partial_{z_0}\mathcal{H}(z_0, t), \\ \dot{z}_1 &= J\mathcal{H}''_{zz}(z_0, t)z_1 + \frac{1}{2\hbar}(J\partial_{z_0} \text{Sp}(\mathcal{H}''_{zz}(z_0, t)\Delta_2)), \\ \dot{\Delta}_2 &= J\mathcal{H}''_{zz}(z_0, t)\Delta_2 - \Delta_2\mathcal{H}''_{zz}(z_0, t)J. \end{aligned} \quad (20.21)$$

Первое уравнение (20.21) представляет систему уравнений Гамильтона. Если решение системы Гамильтона  $z_0 = Z_0(t)$  известно и известен полный набор решений системы в вариациях

$$\dot{a}_k = \mathcal{H}_{\text{var}}(t)a_k, \quad k = \overline{1, n}, \quad \mathcal{H}_{\text{var}}(t) = J\mathcal{H}''_{zz}(Z_0(t), t), \quad (20.22)$$

нормированных условием

$$\{a_k(t), a_l(t)\} = \{a_k^*(t), a_l^*(t)\} = 0, \quad \{a_k^*(t), a_l(t)\} = -2i\delta_{kl}, \quad (20.23)$$

где  $\{a, b\}$  – кососкалярное произведение

$$\begin{aligned} \{a, b\} &= \langle a, Jb \rangle = \langle \vec{W}_a, \vec{Z}_b \rangle - \langle \vec{Z}_a, \vec{W}_b \rangle, \\ a &= \begin{pmatrix} \vec{W}_a \\ \vec{Z}_a \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} \vec{W}_b \\ \vec{Z}_b \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (20.24)$$

то общее решение двух последних уравнений (20.21) имеет вид

$$z_1(t) = \sum_{k=1}^n [b_k(t)a_k(t) + b_k^*(t)a_k^*(t)], \quad (20.25)$$

$$\Delta_2(t) = A(t)\mathcal{D}A^\top(t), \quad (20.26)$$

где

$$\begin{aligned} 2ib_k(t) &= \int_0^t \{a_k^*(t), F(t)\}dt + 2ib_k, \\ 2\hbar F(t) &= (J\partial_{z_0} \text{Sp}(\mathcal{H}''_{zz}(z_0)\Delta_2))|_{z_0=z_0(t)}, \\ A(t) &= (a_1(t), a_2(t), \dots, a_n(t), a_1^*(t), a_2^*(t), \dots, a_n^*(t)). \end{aligned}$$

Здесь  $b_k$  – постоянные интегрирования, а  $\mathcal{D}$  – произвольная постоянная матрица. Таким образом, в этом приближении решение задачи полностью определяется решением системы Гамильтона и системы в вариациях.

## 21. Гамильтоновость системы уравнений для квантовых средних

Исследуем свойство гамильтоновости полученных выше систем уравнений для квантовых средних. Запишем систему Гамильтона–Эренфеста (20.13) в виде

$$\frac{d\eta}{dt} = \Psi \nabla_{\eta} \bar{\mathcal{H}}, \quad (21.1)$$

где  $\eta = \underline{\eta}^{(M)}$  – вектор фазового пространства, размерность которого зависит от  $M$ ,  $M = 0, \infty$ , а матричнозначная функция  $\Psi = \Psi^{(M)}(\eta)$  и функция  $\bar{\mathcal{H}} = \bar{\mathcal{H}}^{(M)}(\eta)$  имеют специальный вид, который мы приведем ниже.

По определению, при  $M = 0$

$$\eta^{(0)} \in \mathbb{R}^{2n}, \quad \bar{\mathcal{H}}^{(0)} = \mathcal{H}(\eta^{(0)}),$$

и  $\Psi^{(0)} = J$  – стандартная  $2n \times 2n$  кососимметричная матрица. Таким образом, при  $M = 0$  система (21.1) является гамильтоновой системой на  $\mathbb{R}^{2n}$ .

При  $M > 0$  совокупность динамических переменных  $\eta^{(M)}$  разбивается на группы

$$\eta^{(M)} = (z, \Delta^1, \Delta^2, \dots, \Delta^M). \quad (21.2)$$

Здесь  $z \in \mathbb{R}^{2n}$ , а  $\Delta^l$  – вектор размерности  $(2n)^l$ , компоненты  $\Delta_a^l$  которого занумерованы  $l$ -мерным целочисленным мультииндексом  $a = (a_1, \dots, a_l)$ ,  $1 \leq a_i \leq 2n$ . Функция  $\bar{\mathcal{H}}^{(M)}$  имеет вид

$$\bar{\mathcal{H}}^{(M)}(\eta^{(M)}) = \mathcal{H}(z) + \mathcal{H}_1(z, \Delta^1) + \dots + \mathcal{H}_M(z, \Delta^M), \quad (21.3)$$

где

$$\mathcal{H}_l(z, \Delta^l) = \frac{1}{l!} \sum_a (\partial_a^l \mathcal{H})(z) \Delta_a^l.$$

Здесь и далее приняты обозначения

$$\partial_a^l \mathcal{H} = \frac{\partial^l \mathcal{H}}{\partial z_{a_1} \dots \partial z_{a_l}}, \quad \sum_a = \sum_{a_1=1}^{2n} \dots \sum_{a_l=1}^{2n}, \quad (21.4)$$

и размерность  $l$  мультииндекса  $a$  фиксирована и ясна из контекста.

Матрица  $\Psi^{(M)}$  имеет блочно-диагональную структуру<sup>6</sup>

$$\Psi^{(M)} = \begin{pmatrix} J & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Omega^{(M)} \end{pmatrix},$$

при этом блок  $J_{2n \times 2n}$  отвечает переменным  $z$ , нулевой блок  $0_{2n \times 2n}$  – переменным  $\Delta^1$ , а  $\Omega^{(M)}$  – переменным  $\Delta^{(M)} \equiv \{\Delta^l, 2 \leq l \leq M\}$ . При фиксированных значениях мультииндексов  $a$  длины  $l_a \geq 2$  и  $b$  длины  $l_b \geq 2$  матричный элемент  $\Omega_{ba}^{(M)}$  равен

$$\Omega_{ba}^{(M)} = \begin{cases} \Omega_{ba}, & 4 \leq l_a + l_b \leq M + 2 \\ 0, & l_a + l_b > M + 2, \end{cases} \quad (21.5)$$

где обозначено

$$\Omega_{ba} = \sum_{k=1}^{l_a} \sum_{j=1}^{l_b} J_{a_k b_j} (\Delta_{b_j(\tilde{a}_k)}^{l_a + l_b - 2} - \Delta_{\tilde{b}_j}^{l_b - 1} \Delta_{\tilde{a}_k}^{l_a - 1}), \quad (21.6)$$

а мультииндексы

$$\begin{aligned} b^n(\tilde{a}_k) &= b_1 \dots b_{n-1} a_1 \dots a_{k-1} a_{k+1} \dots a_{l_a} b_{n+1} \dots b_{l_b}, \\ \tilde{a}_k &= a_1 \dots a_{k-1} a_{k+1} \dots a_{l_a} \end{aligned} \quad (21.7)$$

имеют длины  $l_a + l_b - 2$  и  $l_a - 1$  соответственно.

При фиксированном  $M < \infty$  будем называть систему (21.1) системой Гамильтона–Эренфеста порядка  $M$ , или конечной  $M$ -системой, а при  $M = \infty$  – бесконечной системой. В соответствии с введенными обозначениями перепишем ее в более явном виде

<sup>6</sup>При  $M = 1$  блок  $\Omega^{(M)}$  отсутствует (размерность соответствующего пространства равна нулю).

$$\begin{aligned}
\dot{z}_k &= \sum_{j=1}^{2n} J_{kj} \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}^{(M)}}{\partial z_j}, \quad k = \overline{1, 2n}, \\
\dot{\Delta}_k^1 &= 0, \quad k = \overline{1, 2n}, \\
\dot{\Delta}_b^{l_b} &= \sum_{l_a=2}^M \sum_a \Omega_{ba}^{(M)} \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}^{(M)}}{\partial \Delta_a^{l_a}}, \quad 2 \leq l_b \leq M.
\end{aligned} \tag{21.8}$$

В случае  $M < \infty$  конечная  $M$ -система (21.1) приближенно ( $\text{mod } \hbar^{(M+1)/2}$ ,  $\hbar \rightarrow 0$ ) описывает эволюцию конечномерного вектора квантовых средних  $\eta^{(M)}$  – моментов порядка не выше  $M$  операторов  $\hat{x}$  и  $\hat{p}$ . В отличие от набора  $\eta^{(\infty)}$ , при конечных  $M$  компоненты вектора  $\eta^{(M)}$  являются квантовыми средними, рассчитанными не по любому решению уравнения Шрёдингера, а по специальным – квазиклассически-сосредоточенным состояниям.

Нас интересует, являются ли  $M$ -системы (21.1) гамильтоновыми при каждом  $M$ . Следуя [37], мы называем систему гамильтоновой относительно заданной скобки Пуассона  $\{, \}$  на некотором многообразии  $\mathcal{M}$ , если она представима в виде  $\dot{\eta}^j = \{\eta^j, H\}$ , где  $\eta^j$  – локальные координаты на  $\mathcal{M}$ ,  $H(\eta)$  – гладкая функция. Подчеркнем, что мы не требуем невырожденности скобки Пуассона, в частности, пространство  $\mathcal{M}$  может быть нечетномерным.

Определим для функций  $A(z, \Delta^1, \Delta^{(\infty)})$ ,  $B(z, \Delta^1, \Delta^{(\infty)})$  операцию

$$\{A, B\}^\infty = \{A, B\}_J + \{A, B\}_\Omega^\infty, \tag{21.9}$$

где

$$\{A, B\}_J = \sum_{k=1}^{2n} \sum_{n=1}^{2n} J_{kj} \frac{\partial A}{\partial z_k} \frac{\partial B}{\partial z_j}$$

– стандартная скобка Пуассона на  $\mathbb{R}^{2n}$ ,

$$\begin{aligned}
\{A, B\}_\Omega^\infty &= \sum_{l_a=1}^{\infty} \sum_{l_b=1}^{\infty} \sum_a \sum_b \Omega_{ba} \frac{\partial A}{\partial \Delta_b^{l_b}} \frac{\partial B}{\partial \Delta_a^{l_a}}, \\
\Omega_{ba} &= \begin{cases} \Omega_{ba}^{(\infty)}, & l_a \geq 2, l_b \geq 2; \\ 0, & l_a = 1 \text{ либо } l_b = 1, \end{cases}
\end{aligned} \tag{21.10}$$

где  $\Omega_{ba}^{(\infty)}$  определена в (21.5).

**Утверждение 21.1.** *Соотношения (21.9), (21.10) задают скобку Пуассона.*

**Доказательство.** Утверждение будет доказано, если мы покажем, что скобка (21.9) антисимметрична и удовлетворяет тождествам Якоби и Лейбница [37].

1. Антисимметричность матрицы  $\Omega = \|\Omega_{ab}\|$  следует из определения (21.10), (21.5) и антисимметричности матриц  $J$  и линейной части  $\omega^\infty$  матрицы  $\Omega^{(\infty)}$ , элементы  $\omega_{ab}^\infty$  которой есть средние оператора

$$[\hat{\Delta}_a^{l_a}, \hat{\Delta}_b^{l_b}] \equiv \hat{\omega}_{ab} = i\hbar \sum_{k=1}^{l_a} \sum_{n=1}^{l_b} J_{a_k b_n} \hat{\Delta}_{b^n(\hat{a}_k)}^{l_a+l_b-2} \quad l_a \geq 1, \quad l_b \geq 1; \tag{21.11}$$

при  $l_a \geq 2$  и  $l_b \geq 2$ :

$$\begin{aligned}
\omega_{ab}^\infty &= \omega_{ab}, \quad l_a \geq 2, \quad l_b \geq 2, \\
\omega_{ab} &= \frac{1}{i\hbar} \langle \hat{\omega}_{ab} \rangle = \sum_{k=1}^{l_a} \sum_{j=1}^{l_b} J_{a_k b_j} \Delta_{b^j(\hat{a}_k)}^{l_a+l_b-2}, \quad l_a \geq 1, \quad l_b \geq 1, \\
\omega_{ab} &= -\omega_{ba}.
\end{aligned} \tag{21.12}$$

Таким образом,  $\{A, B\}^\infty = -\{B, A\}^\infty$ .

2. Выполнение тождества Лейбница очевидно.

3. Тождество Якоби для скобки  $\{, \}^\infty$  следует из тождества Якоби для  $\{, \}_J$  и  $\{, \}_\Omega^\infty$  по отдельности в силу перестановочности производных по переменным  $z$  и по переменным  $\Delta$  и тождества Лейбница. Поскольку тождество Якоби для  $\{, \}_J$  общеизвестно, для завершения доказательства утверждения осталось доказать следующую лемму.

**Лемма 21.1.** *Справедливо соотношение*

$$\sum_{l_d=1}^{\infty} \sum_d G_{abc} \Omega_{cd} \frac{\partial}{\partial \Delta_d} \Omega_{ab} = 0. \quad (21.13)$$

Здесь  $G$  означает суммирование по циклическим перестановкам  $a, b, c$ .

**Доказательство.** Линейная часть  $\omega^\infty$  (21.12) матрицы  $\Omega^{(\infty)}$  (21.5) удовлетворяет тождеству Якоби в силу соотношения, следующего из (21.11):

$$\sum_{l_d=2}^{\infty} \omega_{cd}^\infty \frac{\partial}{\partial \Delta_d} \omega_{ab}^\infty = \langle [\hat{\Delta}_c, [\hat{\Delta}_a, \hat{\Delta}_b]] \rangle, \quad l_a \geq 2, l_b \geq 2, l_c \geq 2$$

и справедливости тождества Якоби для коммутатора  $[, ]$ .

Наличие квадратичной части матрицы  $\Omega^{(\infty)}$  приводит при подстановке его в левую часть тождества Якоби к слагаемым, каждое из которых содержит множитель такого вида

$$\sum_{i=1}^{l_b} \sum_{j=1}^{l_b} J_{c_m b_i} J_{a_k b_j} + J_{b_i a_k} J_{c_m b_j}.$$

Поменяв во втором слагаемом  $j$  и  $i$  местами и используя антисимметричность  $J$ , получаем справедливость тождества Якоби для  $\Omega^\infty$ .

Тождество Якоби для  $\Omega$  следует из тождества Якоби для  $\Omega^{(\infty)}$  и определения (21.10).

**Утверждение 21.2.** *Скобка Пуассона  $\{, \}_\Omega^\infty$  (21.10) по переменным  $\Delta^1, \Delta^{(\infty)}$  является обобщенной скобкой Дирака, т.е. представима в виде*

$$\{A, B\}_\Omega^\infty = \{A, B\}_\omega^\infty + \sum_{k=1}^{2n} \sum_{j=1}^{2n} (R^{-1})_{kj} \{\Delta_k^1, A\}_\omega^\infty \{\Delta_n^1, B\}_\omega^\infty, \quad (21.14)$$

$$R = \|\{\Delta_k^1, \Delta_j^1\}_\omega^\infty\|,$$

где линейная скобка  $\{, \}_\omega^\infty$  порождена матрицей  $\omega$ , определенной в (21.12) при  $l_a \geq 1$  и  $l_b \geq 1$ , и имеет вид

$$\{A, B\}_\omega^\infty = \sum_{l_a=1}^{\infty} \sum_{l_b=1}^{\infty} \sum_a \sum_b \omega_{ba} \frac{\partial A}{\partial \Delta_b^{l_b}} \frac{\partial B}{\partial \Delta_a^{l_a}}.$$

**Доказательство.** По определению, скобки  $\{, \}_\omega^\infty$  и в силу  $\Delta^0 \equiv 1$  имеем  $R = -J$  и, следовательно,

$$R^{-1} = J. \quad (21.15)$$

Далее,

$$\{\Delta_n^1, B\}_\omega^\infty = - \sum_{l_a=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{l_b} J_{nbk} \Delta_{b_k}^{l_b-1} \frac{\partial B}{\partial \Delta_a^{l_a}}. \quad (21.16)$$

Подставив (21.15), (21.16) в правую часть (21.14) получаем (21.9), (21.10) и убеждаемся в справедливости утверждения 21.2.

**Теорема 21.1.** Система (21.1) при  $M = \infty$  является гамильтоновой системой относительно нелинейной скобки Пуассона (21.9), (21.10), т.е. имеет вид

$$\dot{\eta}_j = \{\eta_j, \mathcal{H}^{(\infty)}\}^\infty, \quad \vec{\eta} = (z, \Delta^1, \Delta^{(\infty)}),$$

что эквивалентно

$$\begin{aligned} \dot{z}_j &= \{z_j, \mathcal{H}^{(\infty)}\}_J, & z &\in \mathbb{R}^{2n}; \\ \dot{\Delta}_k &= \{\Delta_k, \mathcal{H}^{(\infty)}\}_\Omega^\infty, & \Delta &= (\Delta^1, \Delta^{(\infty)}), \end{aligned} \quad (21.17)$$

где  $\{\cdot, \cdot\}_\Omega^\infty$  – обобщенная скобка Дирака (21.14).

**Доказательство.** Из сравнения (21.17) и (21.8) при  $M = \infty$  с учетом определения скобок (21.9), (21.10), а также как следствие утверждений 21.1 и 21.2 получаем справедливость теоремы.

Перейдем к изучению свойств систем Гамильтона–Эренфеста конечного порядка, которые можно получить из системы бесконечного порядка с учетом оценки

$$\Delta_a^{l_a} = O(\hbar^{l_a/2}), \quad \hbar \rightarrow 0, \quad (21.18)$$

путем отбрасывания слагаемых порядка  $\hbar^{m/2}$ ,  $m \geq M + 1$ , для конечных целых  $M$ . Таким образом, система Гамильтона–Эренфеста порядка  $M$  совпадает с системой бесконечного порядка с точностью до слагаемых  $O(\hbar^{(M+1)/2})$ . Важно, что таким способом получают замкнутые системы относительно набора переменных  $z, \Delta^1, \Delta^{(M)}$ .

Заметим, что  $\Delta^1 = \text{const}$  является решением системы Гамильтона–Эренфеста, а из определения  $\Delta^1$  следует, что эта константа равна нулю, поскольку  $\langle \hat{z} - \langle z \rangle \rangle = 0$ . Принимая это во внимание, будем рассматривать системы относительно набора переменных  $(z, \Delta^{(M)})$  при  $\Delta^1 = 0$ .

Определим для функций  $A(z, \Delta^{(M)})$  и  $B(z, \Delta^{(M)})$  ( $M < \infty$ ) операцию

$$\{A, B\}^{(M)} = \{A, B\}_J + \{A, B\}_\Omega^{(M)}, \quad (21.19)$$

$$\{A, B\}_\Omega^{(M)} = \sum_{l_a=2}^{\infty} \sum_{l_b=2}^{\infty} \sum_a \sum_b \Omega_{ba}^{(M)} \frac{\partial A}{\partial \Delta_b^{l_b}} \frac{\partial B}{\partial \Delta_a^{l_a}}, \quad M < \infty, \quad (21.20)$$

где символ  $\Omega_{ba}^{(M)}$  определен в (21.5).

**Теорема 21.2.** Системы Гамильтона–Эренфеста порядка  $M$  при  $M = 2$  и  $M = 3$  являются гамильтоновыми относительно скобки Пуассона (21.19), (21.20):

$$\dot{\eta}^{(2)} = \{\eta^{(2)}, \mathcal{H}^{(2)}\}^{(2)}, \quad \eta^{(2)} = (z, \Delta^{(2)}) = (z, \Delta^2), \quad (21.21)$$

$$\dot{\eta}^{(3)} = \{\eta^{(3)}, \mathcal{H}^{(3)}\}^{(3)}, \quad \eta^{(3)} = (z, \Delta^{(3)}) = (z, \Delta^2, \Delta^3). \quad (21.22)$$

Справедливость теоремы вытекает из следующего утверждения.

**Утверждение 21.3.** 1. Формулы (21.19), (21.20) задают скобку Пуассона только при  $M = 2$  и  $M = 3$ .

2. Для конечных  $M \geq 4$  операция (21.19), (21.20) не является скобкой Пуассона.

**Доказательство.** Очевидно, что свойство симметричности и тождество Лейбница для операции (21.19), (21.20) выполнены при любом конечном  $M$ . Таким образом, остается доказать, что тождество Якоби при  $M = 2; 3$  имеет место, а при  $4 \leq M < \infty$  нет. Первый пункт утверждения следует из линейности тензора  $\Omega_{ab}^{(M)}$  (21.3) при  $M = 2; 3$  по переменным  $\Delta^{(M)}$  и из справедливости следующей леммы.

**Лемма 21.2.** Операция, определенная на функциях  $A(\Delta^{(M)})$ ,  $B(\Delta^{(M)})$

$$\begin{aligned} \{A, B\}_\omega^{(M)} &= \sum_{l_a=2}^{\infty} \sum_{l_b=2}^{\infty} \sum_a \sum_b \omega_{ba}^{(M)} \frac{\partial A}{\partial \Delta_b^{l_b}} \frac{\partial B}{\partial \Delta_a^{l_a}}, \\ \omega_{ba}^{(M)} &= \begin{cases} \omega_{ba}^\infty, & 4 \leq l_a + l_b \leq M + 2, \\ 0, & l_a + l_b > M + 2 \end{cases}, \quad l_a \geq 2, l_b \geq 2, \end{aligned}$$

где  $\omega_{ba}^\infty$  определена в (21.12), является линейной скобкой Пуассона.



**Доказательство.** Подставляя  $\omega_{ab}^{(M)}$  в левую часть тождества Якоби, получим

1) для  $a, b, c$  таких, что  $l_a + l_b + l_c \leq M + 4$  в силу (21.12)

$$\sum_{l_d=2}^{\infty} \sum_d G_{abc} \omega_{cd}^{(M)} \frac{\partial}{\partial \Delta_d} \omega_{ab}^{(M)} = G_{abc} \langle [\hat{\Delta}_c, [\hat{\Delta}_a, \hat{\Delta}_b]] \rangle = 0;$$

2) для  $a, b, c$  таких, что  $l_a + l_b + l_c > M + 4$ ,  $2 \leq l_a \leq M$ ,  $2 \leq l_b \leq M$ ,  $2 \leq l_c \leq M$  получим ноль в силу способа укорочения:

$$l_c + l_d = l_c + (l_a + l_b - 2) > M + 2 \Rightarrow \Phi_{cd} = 0.$$

Второй пункт утверждения 21.3 проверяется непосредственной подстановкой  $\Omega_{ab}^{(M)}$  в левую часть тождества Якоби. Тогда получим

$$\sum_{l_d=2}^{\infty} \sum_d G_{abc} \Omega_{cd} \frac{\partial}{\partial \Delta_d} \Omega_{ab} = \begin{cases} 0, & l_a + l_b + l_c < M + 4; \\ O(\hbar^{(M+1)/2}), & l_a + l_b + l_c > M + 4. \end{cases}$$

Здесь возникает невязка, так как для конечных  $M$ -систем компоненты тензора  $\Omega_{cd}$  равны нулю при  $l_d > M + 2 - l_c$ , в отличие от (21.13) для системы Гамильтона–Эренфеста бесконечного порядка. Доказательство утверждения 21.3 закончено.

Изучим подробнее системы (21.21) и (21.22). Для простоты ограничимся одномерным случаем  $n = 1$ .

При  $M = 2$  система (21.21) примет вид

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial \mathcal{H}^{(2)}}{\partial p}, & \dot{p} &= -\frac{\partial \mathcal{H}^{(2)}}{\partial x}, \\ \dot{\vec{y}} &= \Omega^{(2)} \nabla_y \mathcal{H}^{(2)}; \\ \mathcal{H}^{(2)} &= \mathcal{H}(z) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \left( \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial z_i \partial z_j} \right) (z) \Delta_{ij}^2, \end{aligned} \quad (21.23)$$

$$\begin{aligned} z_1 &= x, & z_2 &= p, & \vec{y} &= (y_1, y_2, y_3, y_4), \\ y_1 &= \Delta_{11}^2, & y_2 &= \Delta_{12}^2, & y_3 &= \Delta_{21}^2, & y_4 &= \Delta_{22}^2; \end{aligned}$$

$$\Omega^{(2)} = 2 \begin{pmatrix} 0 & y_1 & y_1 & y_2 + y_3 \\ -y_1 & 0 & 0 & y_4 \\ -y_1 & 0 & 0 & y_4 \\ -y_2 - y_3 & -y_4 & -y_4 & 0 \end{pmatrix}.$$

**Утверждение 21.4.** Матрица  $\Omega^{(2)}$  при каждом значении  $\vec{y}$  (21.23) является элементом алгебры Ли  $\mathfrak{g}$ , изоморфной прямой сумме одномерной алгебры и алгебры  $\mathfrak{sp}(2, \mathbb{R})$ . Интегралами системы являются функция  $\mathcal{H}^{(2)}$  и функции Казимира  $k_1 = y_1 y_4 - y_2 y_3 = \Delta_{11}^2 \Delta_{22}^2 - \Delta_{12}^2 \Delta_{21}^2$ ,  $k_2 = y_2 - y_3 = \Delta_{12}^2 - \Delta_{21}^2$ .

**Доказательство.** 1. Матрицу  $\Omega^{(2)}$  можно рассматривать как структурный тензор алгебры Ли с коммутационными соотношениями

$$\begin{aligned} [y_1, y_2] &= y_1, & [y_1, y_3] &= y_1, & [y_1, y_4] &= y_2 + y_3, \\ [y_2, y_3] &= 0, & [y_2, y_4] &= y_4, & [y_3, y_4] &= y_4. \end{aligned}$$

В новом базисе

$$\alpha = -\frac{y_1 + y_4}{4}, \quad \beta = -\frac{y_1 - y_4}{4}, \quad \gamma = -\frac{y_2 + y_3}{4}, \quad \delta = -\frac{y_3 - y_4}{4}$$

структурный тензор примет вид

$$\Omega^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma & -\beta & 0 \\ -\gamma & 0 & -\alpha & 0 \\ \beta & \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

откуда следует, что алгебра  $\mathfrak{g}$  изоморфна прямой сумме одномерной алгебре Ли и  $sp(2, \mathbb{R})$ .

2. Прямыми вычислениями проверяется, что  $\nabla_y k_i \in \text{Ker } \Omega^{(2)}$ ,  $i = 1, 2$ .  
Положим  $M = 3$ . Введем обозначения

$$\begin{aligned} a &= \Delta_{111}^3, & b_1 &= \Delta_{112}^3, & b_2 &= \Delta_{121}^3, & b_3 &= \Delta_{211}^3, \\ d &= \Delta_{222}^3, & c_1 &= \Delta_{122}^3, & c_2 &= \Delta_{212}^3, & c_3 &= \Delta_{221}^3, \\ b &= \frac{b_1 + b_2 + b_3}{3}, & c &= \frac{c_1 + c_2 + c_3}{3} \end{aligned}$$

в дополнение к обозначениям (21.23). Учтем связи  $b_1 = b_2 = b_3 = b$ ,  $c_1 = c_2 = c_3 = c$ , следующие из определения операторов  $\hat{\Delta}^3$  (20.8). Тогда система (21.22) примет вид

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial \mathcal{H}^{(3)}}{\partial p}, & \dot{p} &= -\frac{\partial \mathcal{H}^{(3)}}{\partial x}, & (p, x) &\equiv z, \\ \dot{\vec{y}} &= \Omega^{(3)} \nabla_y \mathcal{H}^{(3)}, \\ \mathcal{H}^{(3)} &= \mathcal{H}^{(2)} + \frac{1}{6} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^2 \frac{\partial^3 \mathcal{H}}{\partial z_i \partial z_j \partial z_k} \Delta_{ijk}^3, & z_1 &= x, & z_2 &= p, \\ \vec{y} &= (y_1, y_2, y_3, y_4, a, b_1, b_2, b_3, c_1, c_2, c_3, d), \\ \Omega^{(3)} &= \begin{pmatrix} \Omega^{(2)} & R \\ R^t & 0 \end{pmatrix}, \\ R &= \begin{pmatrix} 0 & 2a & 2a & 2a & 4b & 4b & 4b & 6c \\ -3a & -b & -b & -b & c & c & c & 3d \\ -3a & -b & -b & -b & c & c & c & 3d \\ -6b & -4c & -4c & -4c & 2d & 2d & 2d & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (21.24)$$

где  $R^T$  – транспонированная к  $R$  матрица, а первые четыре компоненты вектора  $\vec{y}$  и матрица  $\Omega^{(2)}$  определены в (21.23).

**Утверждение 21.5.** Матрица  $\Omega^{(3)}$  при каждом значении  $\vec{y}$  (21.24) является элементом алгебры Ли, изоморфной полупрямой сумме восьмимерной абелевой алгебры Ли и алгебры  $\mathfrak{g}$ , определенной в утверждении 21.4. Интегралами системы (21.22) являются функция  $\mathcal{H}^{(3)}$  и функции Казимира

$$\begin{aligned} k_1 &= (ad)^2 - 6abcd + 4(ac^3 + b^3d) - 3b^2c^2, & k_2 &= b_1 - b_2, \\ k_3 &= b_1 - b_3, & k_4 &= c_1 - c_2, & k_5 &= c_1 - c_3. \end{aligned}$$

**Доказательство** следует из явного вида тензора  $\Omega^{(3)}$  и проверки равенства  $\nabla_y k_i \in \text{Ker } \Omega^{(3)}$ ,  $i = \overline{1, 5}$ .

## 22. Энергетический спектр и система уравнений для квантовых средних

Рассмотрим задачу о нахождении спектра энергий стационарных состояний из системы для квантовых средних. Вопрос о связи решений системы<sup>7</sup> (20.13) и спектра энергий решается следующим образом:

**Теорема 22.1.** Пусть спектральная задача для оператора Шрёдингера

$$\hat{\mathcal{H}}\varphi_\nu = E_\nu \varphi_\nu \quad (22.1)$$

имеет только дискретный спектр. Если решение системы (20.13) можно получить в почти периодических функциях [25]:

<sup>7</sup>Все сказанное справедливо и для системы (20.4).

$$\mathbf{g}(t, \hbar) = \sum_{|\nu+\nu'|=0}^{\infty} \mathbf{g}_{\nu}(\hbar) e^{i\omega_{\nu,\nu'}t}, \quad (22.2)$$

где  $\mathbf{g} = (z_a, \Delta_{a_1, a_2}^{(2)}, \Delta_{a_3, a_4, a_5}^{(3)}, \dots)$ ,  $a_l = \overline{1, 2n}$ ,  $l = 0$ ,  $N(N+1)/2$ ;  $y_{\nu}$  – коэффициенты разложения в обобщенный ряд Фурье функции  $y(t, \hbar)$ , тогда  $\omega_{\nu,\nu'}$  – комбинационные частоты Ритца (mod  $\hbar^{(N+1)/2}$ ):

$$\hbar\omega_{\nu,\nu'} = E_{\nu} - E_{\nu'}, \quad \nu, \nu' \in \mathbb{Z}_+^n. \quad (22.3)$$

**Доказательство.** Поскольку  $\varphi_{\nu}$  – полный набор стационарных состояний уравнения (22.1), то любое решение нестационарного уравнения (8.2) с гамильтонианом (22.1) может быть представлено в виде

$$\Psi(\vec{x}, t) = \sum_{|\nu'|=0}^{\infty} C_{\nu'} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_{\nu'} t\right] \varphi_{\nu'}(\vec{x}). \quad (22.4)$$

Усреднив  $\hat{\mathbf{g}} = (\hat{z}_a, \hat{\Delta}_{a_1, a_2}^{(2)}, \hat{\Delta}_{a_3, a_4, a_5}^{(3)}, \dots)$  по состоянию  $\Psi$ , получим (22.2) и (22.3). Теорема доказана.

Заметим, что только ограниченные по времени решения системы (20.13) пригодны для получения спектра. Вакуумное значение энергии, отвечающее основному состоянию  $\Psi_0$ , квазиклассически сосредоточенному на лагранжевом торе  $\Lambda^k$  ( $z = Z(t, \tau, \hbar)$ ,  $\tau \in U \subset \mathbb{R}^k$ ), можно определить из соотношения

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle = \sum_{l=0}^N \frac{1}{l!} \int_{\Lambda^k} \mathcal{H}_a^{(l)}(Z(t, \tau, \hbar)) \Delta_a^{(l)}(Z(t, \tau, \hbar)) d\tau + O(\hbar^{(N+1)/2}), \quad (22.5)$$

в котором  $\Delta_a^{(k)}$  надо выбрать такими, чтобы они минимизировали соотношение неопределенностей (20.16).

Если известны вакуумное значение энергии  $E_0$  и полный набор частот Ритца  $\omega_{\nu}$ , восстановление точного спектра  $E_{\nu}$  представляет известную в спектроскопии проблему. Мы можем дать решение этой задачи в квазиклассическом приближении, выбрав для классификации спектральных серий инвариантные многообразия  $\mathbf{g}_0(t)$  исходной системы (20.13), где  $\mathbf{g}_0(t)$  определяется соотношением

$$\mathbf{g}(t) = \mathbf{g}_0(t) + \hbar \mathbf{g}_1(t) + \dots \quad (22.6)$$

В простейшем случае точки покоя  $Z_0(t) = Z_0 = \text{const}$ ,  $\Delta_2 = \text{const}$  из (20.21) имеем

$$\mathcal{H}_z(Z_0) = 0, \quad \mathcal{H}_{\text{var}}(Z_0) \Delta_2 + \Delta_2 \mathcal{H}_{\text{var}}^{\top}(Z_0) = 0. \quad (22.7)$$

Если точка покоя устойчива в линейном приближении [32], то

$$a_k(t) = \exp(i\Omega_k t) f_k, \quad \text{Im } \Omega_k = 0, \quad (22.8)$$

где  $f_k$  – собственный вектор матрицы в вариациях

$$\mathcal{H}_{\text{var}}(Z_0) f_k = i\Omega_k f_k, \quad (22.9)$$

нормированный условием (20.23). Формулы (20.25) теперь примут вид

$$Z_1(t) = \sum_{k=1}^n \text{Re} \left[ \frac{\{f_k^*, F\}}{\Omega_k} f_k + b_k e^{i\Omega_k t} f_k \right], \quad (22.10)$$

$$2\Delta_2 = \sum_{k=1}^n (f_k f_k^+ + f_k^* f_k^{\top}) \mathcal{D}_k + i\hbar J, \quad f_k^+ = (f_k^*)^{\top}.$$

Следовательно, условия квантования (22.3) примут вид

$$E_{\nu_1; \nu_2; \dots; \nu_n} - E_{\nu_1 - \delta_{1k}; \dots; \nu_n - \delta_{nk}} = \hbar \Omega_k, \quad (22.11)$$

где  $\delta_{kl}$  – символ Кронекера. Последовательно применяя соотношение (22.11), для  $E_\nu$  получим

$$E_{\nu_1; \nu_2; \dots; \nu_n} = E_{0,0,\dots,0} + \hbar \sum_{k=1}^n \Omega_k \nu_k. \quad (22.12)$$

Начальный уровень  $E_0$  можно определить из соотношения (22.5), которое для  $N = 2$ ,  $k = 0$  примет вид

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \mathcal{H}(Z_0) + \hbar \{ \dot{Z}_0, Z_1 \} + \frac{1}{2} \text{Sp} (\mathcal{H}''_{zz}(Z_0) \Delta_2) + O(\hbar^{3/2}). \quad (22.13)$$

Здесь мы учли, что

$$\langle Z_1, \mathcal{H}_z(Z_0) \rangle = \{ \dot{Z}_0, Z_1 \}.$$

В результате несложного расчета получим

$$E_0 = \mathcal{H}(Z_0) + \sum_{k=1}^n \Omega_k \mathcal{D}_k, \quad (22.14)$$

а константы  $\mathcal{D}_k$  выберем из условия минимизации соотношения неопределенности.

Рассмотрим матрицу  $\Delta_2$ , которая, как было показано, неотрицательно определена. Для любого  $a$  имеем

$$a^+ \Delta_2 a \geq 0,$$

и равенство нулю означает минимизацию соотношения неопределенностей. Выберем в качестве  $a = J \cdot f_k$ ,  $k = \overline{1, n}$ , тогда несложно получить

$$\mathcal{D}_k \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (22.15)$$

Выбрав  $\mathcal{D}_k = \hbar/2$ , мы минимизируем соотношение неопределенностей и для энергии  $E_\nu$  получим

$$E_\nu = \mathcal{H}(Z_0, \hbar) + \hbar \sum_{k=1}^n \Omega_k \left( \nu_k + \frac{1}{2} \right), \quad (22.16)$$

что совпадает с хорошо известным в гармоническом приближении результатом (см., например, [32]).

Рассмотрим случай замкнутых фазовых траекторий

$$Z_0(t+T) = Z_0(t), \quad \Delta_2(t+T) = \Delta_2(t), \quad E' < E < E''. \quad (22.17)$$

Пусть система в вариациях (20.22) допускает набор линейно независимых решений Флоке

$$a_k(t+T) = \exp(i\Omega_k T) a_k(t), \quad k = \overline{1, n-1}, \quad (22.18)$$

нормированных условиями (20.23) и таких, что

$$\{ \dot{Z}_0(t), a_k(t) \} = \{ \dot{Z}_0(t), a_k^*(t) \} = 0. \quad (22.19)$$

Тогда  $\Delta_2(t)$  и  $Z_1$  имеют вид<sup>8</sup>

$$\Delta_2(t) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n-1} \mathcal{D}_k (a_k(t) a_k^+(t) + a_k^*(t) a_k^\Gamma(t)) + \mathcal{D}_n \dot{Z}_0(t) \dot{Z}_0^\Gamma(t) + \frac{i\hbar}{2} J,$$

<sup>8</sup>Векторы  $\dot{Z}_0$  и  $\partial Z_0 / \partial E$  являются сопряженными решениями системы в вариациях и связаны соотношением  $\left\{ \dot{Z}_0(t), \frac{\partial Z_0(t)}{\partial E} \right\} = 1$ .

$$\begin{aligned}
Z_1(t) = & \sum_{k=1}^{n-1} \operatorname{Re} \left[ \frac{a_k(t)}{2i} \int_0^t d\tau \{a_k^*(\tau), F(\tau)\} + a_k(t)b_k \right] - \\
& - \dot{Z}_0(t) \left[ \int_0^t \left\{ \frac{\partial Z_0(\tau)}{\partial E}, F(\tau) \right\} d\tau + \operatorname{Re} b_n \right] + \\
& + \frac{\partial Z_0(t)}{\partial E} \left[ \int_0^t \left\{ \dot{Z}_0(\tau), F(\tau) \right\} d\tau + \operatorname{Im} b_n \right], \tag{22.20}
\end{aligned}$$

где столбец  $F$  определен в (20.25). Функция  $\partial Z_0/\partial E$ , как правило, не ограничена во времени. Действительно, в силу (22.16) имеем

$$Z_0(t) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} Z_0(l) \exp(i\omega lt), \quad \omega = 2\pi/T, \tag{22.21}$$

откуда

$$\frac{\partial Z_0(t)}{\partial E} = \frac{\partial \omega}{\partial E} \frac{t}{\omega} \dot{Z}_0(t) + \tilde{Z}_0; \quad \tilde{Z}_0 = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\partial Z_0(l)}{\partial E} \exp(i\omega lt), \tag{22.22}$$

и если  $\partial \omega/\partial E \neq 0$ , то имеем неограниченный рост по  $t$ . Следовательно, для  $Z(t)$  имеем

$$\begin{aligned}
Z(t) = & Z_0(t) + \hbar \tilde{Z}_1(t) - \hbar \dot{Z}_0(t) \left[ \int_0^t \left\{ \frac{\partial Z_0(\tau)}{\partial E}, F(\tau) \right\} d\tau + \operatorname{Re} b_n \right] + \\
& + \hbar \frac{\partial Z_0(t)}{\partial E} \left[ \int_0^t \left\{ \dot{Z}_0(\tau), F(\tau) \right\} d\tau + \operatorname{Im} b_n \right], \tag{22.23}
\end{aligned}$$

$$\tilde{Z}_1(t) = \operatorname{Re} \sum_{k=1}^{n-1} \left[ \frac{a_k(t)}{2i} \int_0^t \{a_k^*(\tau), F(\tau)\} d\tau + a_k(t)b_k \right],$$

и  $Z(t)$  в общем случае растет с ростом  $t$ . Тем не менее, справедливо следующее утверждение.

**Теорема 22.2.** Если  $\partial \omega/\partial E \neq 0$ , векторы  $a_k(t), k = \overline{1, n-1}$  (22.18) линейно независимы и  $\Omega_k \neq 0, k = \overline{1, n-1}$ , то при

$$\begin{aligned}
\operatorname{Im} b_n = & \frac{1}{2\hbar T} \int_0^T dt \operatorname{Sp} (\mathcal{H}''_{zz}(Z_0(t))\Delta_2(t)) - \frac{1}{2\hbar} \operatorname{Sp} (\mathcal{H}''_{zz}(Z_0(0))\Delta_2(0)) + \\
& + \frac{1}{T} \left( \frac{1}{\omega} \frac{\partial \omega}{\partial E} \right)^{-1} \int_0^T \{ \tilde{Z}_0(\tau), F(\tau) \} d\tau \tag{22.24}
\end{aligned}$$

вектор  $Z(t)$  (22.23) ограничен во времени.

**Доказательство.** Рассмотрим в (22.23) слагаемое, пропорциональное  $\dot{Z}_0$ . Согласно (22.22), получим

$$\begin{aligned} \dot{Z}_0(t) \left[ \frac{1}{\omega} \frac{\partial \omega}{\partial E} \left( - \int_0^t \tau \{ \dot{Z}_0(\tau), F(\tau) \} d\tau + t \int_0^t \{ \dot{Z}_0(\tau), F(\tau) \} d\tau + t \operatorname{Im} b_n \right) - \right. \\ \left. - \int_0^t \{ \tilde{Z}_0(\tau), F(\tau) \} d\tau - \operatorname{Re} b_n \right] = \dot{Z}_0(t) \varphi(t), \end{aligned} \quad (22.25)$$

где  $\tilde{Z}_0(t)$  – периодическая часть  $\partial Z_0 / \partial E$ :

$$\tilde{Z}_0(t) = \frac{\partial Z_0(t)}{\partial E} - \frac{t}{\omega} \frac{\partial \omega}{\partial E} \dot{Z}_0(t). \quad (22.26)$$

Заметим, что

$$\begin{aligned} \{ \dot{Z}_0(\tau), F(\tau) \} &= \frac{1}{2\hbar} \{ \dot{Z}_0(\tau), J \partial_z \} \langle \partial_z, \Delta_2(\tau) \partial_z \rangle \mathcal{H}(z) \Big|_{z=z_0(\tau)} = \\ &= -\frac{1}{2\hbar} \operatorname{Sp} (\dot{\mathcal{H}}''_{zz}(Z_0(\tau)) \Delta_2(\tau)). \end{aligned} \quad (22.27)$$

Подставим (22.27) в (22.25) и проинтегрируем полученное выражение один раз по частям. С учетом соотношения

$$\operatorname{Sp} (\mathcal{H}''_{zz}(Z_0(\tau)) \dot{\Delta}_2(\tau)) = 0 \quad (22.28)$$

получим

$$\begin{aligned} \{ \dot{Z}_0(\tau), F(\tau) \} &= -\frac{1}{2\hbar} \frac{d}{d\tau} \operatorname{Sp} (\mathcal{H}''_{zz}(Z_0(\tau)) \Delta_2(\tau)), \\ \varphi(t) &= \frac{1}{\omega} \frac{\partial \omega}{\partial E} \left[ \frac{\tau}{2\hbar} \operatorname{Sp} (\mathcal{H}''_{zz}(z_0(\tau)) \Delta_2(\tau)) \Big|_0^t - \frac{1}{2\hbar} \int_0^t \operatorname{Sp} (\mathcal{H}''_{zz}(Z_0(\tau)) \Delta_2(\tau)) d\tau - \right. \\ &\quad \left. - \frac{t}{2\hbar} \operatorname{Sp} (\mathcal{H}''_{zz}(Z_0(\tau)) \Delta_2(\tau)) \Big|_0^t + t \operatorname{Im} b_n \right] - \int_0^t \{ \tilde{z}_0(\tau), F(\tau) \} d\tau - \operatorname{Re} b_n. \end{aligned}$$

Выбрав  $\operatorname{Im} b_n$  согласно (22.24), получим, что  $\varphi(t)$  ограничена во времени. По условию теоремы векторы  $a_k(t)$  (22.18) линейно независимы и  $\Omega_k \neq 0$ . Следовательно,  $\tilde{Z}_1(t)$  ограничено во времени. Из соотношений (22.27) и (22.28) следует, что

$$\int_0^T \{ \dot{Z}_0(\tau), F(\tau) \} d\tau = 0. \quad (22.29)$$

Следовательно, в (22.23) ограничено во времени слагаемое, пропорциональное  $\tilde{z}_0(t)$ . Теорема доказана.

Если условия теоремы 22.2 выполнены, то функция  $\mathbf{g}(t, \hbar) = (z_{a_l}(t), \Delta_{a, a_l}(t))$ ,  $a_l = \overline{1, 2n}$ ,  $l = 0, 1, 2$ ) ограничена во времени и может быть использована для определения  $E_\nu$ . Условия квантования (22.3) примут вид

$$E_{\nu_1; \dots; \nu_{n-1}; \nu_n} - E_{\nu_1 - \delta_{1k}; \dots; \nu_{n-1} - \delta_{k, n-1}; \nu_n - \delta_{k, n-1}} = \hbar(\Omega_k + \omega l). \quad (22.30)$$

Следовательно,

$$E_\nu = E_{\nu_n}^0(\omega) + \hbar \sum_{k=1}^{n-1} \Omega_k \nu_k + O(\hbar^{3/2}), \quad E_{\nu_n}^0(\omega) = E_{0, 0, \dots, 0, \nu_n}. \quad (22.31)$$

Для определения  $E_{\nu_n}^0(\omega)$  из (22.30) получим уравнение

$$\frac{\partial E_{\nu_n}^0(\omega)}{\partial \nu_n} = \hbar\omega, \quad E_0^0(\omega) = E_0. \quad (22.32)$$

Здесь  $\omega = 2\pi/T$ , причем

$$T = \frac{\partial W}{\partial E_{\nu_n}^0(\omega)}, \quad W = \int_0^T \langle \vec{P}_0(t), \dot{\vec{X}}_0(t) \rangle dt.$$

Но очевидно, что

$$\frac{\partial W}{\partial \nu_n} = \frac{\partial W}{\partial E_{\nu_n}^0(\omega)} \frac{\partial E_{\nu_n}^0(\omega)}{\partial \nu_n} = \hbar\omega T = 2\pi\hbar.$$

Следовательно,

$$\int_0^T \langle \vec{P}_0(t), \dot{\vec{X}}_0(t) \rangle dt = 2\pi\hbar(\nu_n + \alpha), \quad (22.33)$$

где  $\alpha$  — константа интегрирования. Из (22.32) следует, что

$$\alpha = TE_0^1/(2\pi), \quad \hbar E_0^1 = E_0 - \mathcal{H}(z_0),$$

и условия квантования  $E_{\nu_n}^0(\omega)$  примут вид

$$\int_0^{T(E_0(\nu_n))} \langle \vec{P}(t), \dot{\vec{X}}(t) \rangle dt = 2\pi\hbar\nu_n + \hbar TE_0^1, \quad (22.34)$$

где  $E_0$  определяется из соотношения неопределенностей.

Подставим (22.20) в (22.13) и найдем

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \mathcal{H}(Z_0(t)) + \hbar \operatorname{Im} b_n + \frac{1}{2} \operatorname{Sp} (\mathcal{H}''_{zz}(Z_0(0))\Delta_2(0)) + O(\hbar^{3/2}). \quad (22.35)$$

В результате с учетом (22.24) для  $\langle \mathcal{H} \rangle$  получим

$$\langle \mathcal{H} \rangle = E_{\nu_n}^0(\tilde{\omega}) + \frac{1}{2T} \int_0^T dt \operatorname{Sp} (\mathcal{H}''_{zz}(Z_0(t))\Delta_2(t)) + O(\hbar^{3/2}), \quad (22.36)$$

где обозначено

$$\tilde{\omega} = \omega \left[ 1 - \frac{1}{2T} \int_0^T dt \langle \tilde{Z}_0(t), \nabla \rangle \operatorname{Sp} (\mathcal{H}''_{zz}(z)\Delta_2(t)) \Big|_{z=Z_0(t)} \right]. \quad (22.37)$$

◇ Соотношение (22.36) получено в предположении  $\partial\omega/\partial E \neq 0$ . Покажем, что (22.36) справедливо вне зависимости от этого условия. Выберем в (22.24)

$$\operatorname{Im} b_n = \frac{1}{2\hbar T} \int_0^T dt \operatorname{Sp} (\mathcal{H}''_{zz}(Z_0(t))\Delta_2(t)) - \frac{1}{2\hbar} \operatorname{Sp} (\mathcal{H}''_{zz}(Z_0(0))\Delta_2(0)). \quad (22.38)$$

Тогда с точностью до  $O(\hbar^{3/2})$  (22.23) примет вид

$$z(t) = Z_0\left(t + \frac{\tilde{\omega} - \omega}{\omega}t\right) + \hbar\tilde{Z}_1(t) + \hbar\varphi(t)\dot{Z}_0(t) + \hbar\chi(t)\tilde{Z}_0(t), \quad (22.39)$$

где  $\varphi(t)$  определено в (22.25)

$$\begin{aligned} \varphi(t) = & \frac{1}{\omega} \frac{\partial \omega}{\partial E} \frac{1}{2\hbar} \left[ \int_0^t \text{Sp} (\mathcal{H}''_{zz}(\tau)\Delta_2(\tau)) d\tau - \frac{t}{T} \int_0^T d\tau \text{Sp} (\mathcal{H}''_{zz}(\tau)\Delta_2(\tau)) \right] - \\ & - \int_0^t \{\tilde{Z}_0(\tau), F(\tau)\} d\tau + \frac{t}{T} \int_0^T \{\tilde{Z}_0(\tau), F(\tau)\} d\tau - \text{Re } b_n; \quad (22.40) \\ \chi(t) = & \int_0^t \{\dot{Z}_0(\tau), F(\tau)\} d\tau - \text{Im } b_n. \end{aligned}$$

Из (22.39) следуют условия квантования (22.30), (22.31) с заменой  $\omega$  на  $\tilde{\omega}$ ,  $u$ , соответственно, приходим к (22.36).

Аналогично случаю точки покоя будем выбирать  $E_0$  из условия минимизации соотношения неопределенностей. Выберем в (22.14) в качестве  $a$  полный набор векторов  $a = Ja_k$ ,  $k = \overline{1, n}$ ,  $a_n = \dot{z}_0 + i\partial z_0/\partial E$ . Получим

$$\mathcal{D}_k \geq \hbar/2, \quad \mathcal{D}_n \geq \hbar, \quad k = \overline{1, n-1}. \quad (22.41)$$

Для минимально возможных  $\mathcal{D}_k$  найдем

$$\alpha = \frac{\hbar}{4T} \int_0^T \left( \sum_{k=1}^{n-1} \{\dot{a}_k(\tau), a_k^*(\tau)\} + 2\{\ddot{Z}_0(\tau), \dot{Z}_0(\tau)\} \right) d\tau. \quad (22.42)$$

Обозначив через  $\tilde{a}_k$  периодическую часть вектора  $a_k$ , запишем

$$\tilde{a}_k(t) = e^{-i\Omega_k t} a_k(t), \quad \tilde{a}_k(t+T) = \tilde{a}_k(t), \quad (22.43)$$

$$\alpha = \frac{\hbar}{2} \sum_{k=1}^{n-1} \Omega_k + \frac{\hbar}{T} \gamma, \quad (22.44)$$

$$\gamma = \frac{1}{4} \int_0^T \left( \sum_{k=1}^{n-1} \{\dot{\tilde{a}}_k, \tilde{a}_k^*\} + 2\{\ddot{Z}_0, \dot{Z}_0\} \right) dt. \quad (22.45)$$

При этом  $E_{\nu_n}^0(\omega)$  определяется из условия

$$\int_0^T P_0(t)\dot{X}_0(t)dt = 2\pi\hbar\nu_k \frac{\tilde{\omega}}{\omega} + \frac{\hbar T}{2} \sum_{k=1}^{n-1} \Omega_k + \hbar\gamma, \quad (22.46)$$

а  $E_\nu$  – из (22.31), куда нужно подставить  $z_0 = Z_0(t, E_\nu^0(\tilde{\omega}))$ , определенные из (22.46).

**Гипотеза.** Постоянная  $\alpha$  в (22.42) удовлетворяет соотношению

$$\alpha = \arg \det [B(t) + iC(t)]_0^T, \quad (22.47)$$

а матрицы  $B(t)$ ,  $C(t)$  определены в (10.2). Тогда выбором нормировки показателей Флоке  $\Omega_k$  (они определены с точностью до  $2\pi l$ ) можно добиться  $\gamma = 0$  [8].



Существует ряд конкретных примеров, для которых соотношение (22.47) справедливо. Если соотношение (22.47) неверно в общем случае, то, по-видимому, это связано с «грубостью» использованного метода минимизации соотношения неопределенностей. Тем не менее, наш метод позволяет гарантированно определять частоты Ритца с любой точностью по  $\hbar$ , хотя объем вычислительной работы может быть велик. Условия (22.46) и (22.31) при выполнении (22.47) (с точностью  $O(\hbar^{3/2})$ ) совпадают с условиями квантования равновесных окружностей (см., например, [8]).

## Квазиклассически сосредоточенные состояния уравнения Шрёдингера и геометрические фазы

### 23. Системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с периодическими коэффициентами

Рассмотрим систему обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка с периодическими коэффициентами

$$\dot{\vec{x}} = A(t)\vec{x}, \quad \vec{x} \in \mathbb{R}^n, \quad A(t+T) = A(t) = \|A_{jk}\|_{n \times n}. \quad (23.1)$$

Наряду с уравнениями (23.1) будем рассматривать матричное уравнение

$$\dot{X} = A(t)X, \quad (23.2)$$

где  $X$  –  $n \times n$ -матрица. Нетрудно убедиться, что столбцы матрицы  $X$  являются решениями системы (23.1).

♦  $n \times n$ -Матрица  $X(t)$ , удовлетворяющая уравнению (23.2), называется *фундаментальной матрицей* системы (23.1), если она не вырождена ( $\det X(t) \neq 0$ ,  $t \in [0, T]$ ).

♦  $n \times n$ -Матрица  $X(t)$ , удовлетворяющая уравнению (23.2) и начальному условию  $X(0) = \mathbb{I}_{n \times n} = \|\delta_{ij}\|_{n \times n}$ , называется *матрицантом*, или *матрицей Коши*, системы уравнений (23.1).

#### Свойства матрицанта

**Свойство 23.1.** Матрицант системы уравнений (23.1) удовлетворяет следующему условию:

$$X(t+T) = X(t)X(T). \quad (23.3)$$

**Доказательство.** Обе части соотношения (23.3) удовлетворяют уравнению (23.2) и при  $t = 0$  совпадают. В силу единственности решения задачи Коши утверждение доказано.

**Свойство 23.2.** Пусть  $X(t)$  –  $n \times n$  невырожденная матрица, коэффициенты которой – непрерывные и интегрируемые на  $[0, T]$  функции, а сама матрица удовлетворяет при всех  $t$  условию (23.3). Тогда  $X(t)$  является матрицантом некоторого уравнения с  $T$ -периодическими коэффициентами.

**Доказательство.** Обозначим через

$$A(t) = \dot{X}(t)X^{-1}(t)$$

$n \times n$ -матрицу. Поскольку  $X(t)$  – невырожденная непрерывная матрица с интегрируемыми на  $[0, T]$  коэффициентами, то  $A(t)$  также обладает этими свойствами. Очевидно, что  $X(t)$  удовлетворяет матричному уравнению (23.2). Покажем, что  $A(t)$  –  $T$ -периодические матрицы:

$$A(t+T) = \dot{X}(t+T)X^{-1}(t+T) = \dot{X}(t)X(T)[X(t)X(T)]^{-1} = A(t),$$

что и требовалось доказать.

**Свойство 23.3.** Матрицант системы (23.1) удовлетворяет условию

$$X^{-1}(T) = X(-T). \quad (23.4)$$

**Доказательство.** Положим в соотношении (23.3)  $\tau = -T$  и получим

$$\mathbb{I} = X(0) = X(T)X(-T).$$

**Свойство 23.4.** Решение задачи Коши для неоднородного уравнения

$$\dot{\vec{x}} = A(t)\vec{x} + \vec{f}(t), \quad \vec{x}|_{t=s} = \vec{x}_0 \quad (23.5)$$

имеет вид

$$\vec{x}(t) = X(t-s)\vec{x}_0 + \int_s^t X(t-\tau)f(\tau) d\tau,$$

где  $X(t)$  – матрицант системы (23.1).

**Свойство 23.5.** Если матрица  $A(t)$  не зависит от времени явно, то матрицант системы (23.1) имеет вид

$$X(t) = e^{At} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} A^k. \quad (23.6)$$

**Доказательство.** Продифференцировав (23.6) по  $t$ , получим (23.2), т.е. для (23.6) справедливо уравнение (23.2), и при  $t = 0$  это соотношение обращается в тождество. В силу единственности решения задачи Коши утверждение доказано.

**Свойство 23.6.** Для матрицанта системы (23.1) справедливо следующее представление:

$$\begin{aligned} X(t) = T \exp \left[ \int_0^t A(\tau) d\tau \right] &= \mathbb{I} + \int_0^t d\tau_1 A(\tau_1) + \int_0^t d\tau_1 A(\tau_1) \int_0^{\tau_1} d\tau_2 A(\tau_2) + \\ &+ \int_0^t d\tau_1 A(\tau_1) \int_0^{\tau_1} d\tau_2 A(\tau_2) \int_0^{\tau_2} d\tau_3 A(\tau_3) + \dots \end{aligned} \quad (23.7)$$

**Доказательство.** Проинтегрировав уравнение (23.2) от нуля до  $t$ , получим интегральное уравнение

$$X(t) = \mathbb{I} + \int_0^t A(\tau)X(\tau) d\tau,$$

из которого методом итераций найдем (23.7) (см. разд. «Интегральные уравнения» [4]).

◆ Матрица  $X(T)$  называется *матрицей монодромии*  $T$ -периодической системы (23.1).

Рассмотрим задачу на собственные значения матрицы монодромии

$$X(T)\vec{a} = \rho\vec{a}. \quad (23.8)$$

Представим собственные значения матрицы монодромии в виде

$$\rho_k = e^{iT\Omega_k}, \quad k = \overline{1, m}, \quad m < n. \quad (23.9)$$

◆ Собственные значения матрицы монодромии  $\rho_k$  называются *мультипликаторами Флоке*, а  $\Omega_k$  – *показателями Флоке*. Совокупность мультипликаторов называется спектром системы (23.1).

◇ Мультипликаторы системы (23.1) удовлетворяют уравнению

$$\det [X(T) - \rho\mathbb{I}] = 0. \quad (23.10)$$

Уравнение (23.10) называется *характеристическим*.

**Свойство 23.7.** Каждому мультипликатору  $\rho_k$  отвечает решение уравнения (23.1), удовлетворяющее условию

$$\vec{x}_k(t+T) = \rho_k \vec{x}_k(t). \quad (23.11)$$

♦ Задача о нахождении решения системы (23.1), удовлетворяющих условию (23.11), называется *задачей Флоке*, а сами решения – *решениями Флоке*.

**Доказательство.** Пусть  $\vec{a}_k$  – собственный вектор матрицы монодромии, удовлетворяющие собственному значению  $\rho_k$ . Сопоставим ему решение системы (23.1) по правилу

$$\vec{x}_k(t) = X(t)\vec{a}_k.$$

Тогда, согласно (23.3),

$$\vec{x}_k(t+T) = X(t+T)\vec{a}_k = X(t)X(T)\vec{a}_k = X(t)\rho_k\vec{a}_k = \rho_k\vec{x}_k(t),$$

что и требовалось доказать.

**Теорема 23.1 (Флоке–Ляпунова).** Матрицант системы дифференциальных уравнений (23.1) с  $T$ -периодическими коэффициентами представим в виде

$$X(t) = F(t)e^{tK}, \quad (23.12)$$

где  $F(t)$  – периодическая матрица-функция с периодом  $T$  размера  $n \times n$ , неособая и непрерывная для всех значений  $t$  и удовлетворяющая условию  $F(0) = \mathbb{I}$ , а  $K$  – постоянная  $n \times n$ -матрица.

**Доказательство.** Обозначим через

$$K = \frac{1}{T} \ln X(T),$$

где под  $\ln X$  понимается одно из значений матричного логарифма. Поскольку  $\det X(T) \neq 0$ , то  $\ln X(T)$  существует.

Введем обозначение

$$F(t) = X(t)e^{-tK},$$

тогда

$$F(t+T) = X(t+T)e^{-T K} e^{tK} = X(t)e^{TK} e^{-TK} e^{tK} = F(t).$$

Таким образом, матрицант уравнения (23.1) представим в виде (23.11). Нетрудно заметить, что матрица-функция  $F(t)$  неособая, непрерывная и  $F(0) = \mathbb{I}_{n \times n}$ , т.е. теорема доказана.

**Теорема 23.2.** Пусть  $F(t)$  –  $n \times n$ -матрица, удовлетворяющая условиям предыдущей теоремы, а  $K$  – произвольная постоянная матрица. Тогда матрица  $X(t)$  (23.12) является матрицантом некоторой системы дифференциальных уравнений (23.1) с периодическими коэффициентами.

**Доказательство.** Из (23.12) следует

$$X(t+T) = F(t+T)e^{(t+T)K} = F(t)e^{tT} e^{TK} = X(t)X(T),$$

т.е. матрица  $X(t)$  удовлетворяет условию (23.3).

В дальнейшем мы будем предполагать, что система уравнений (23.1) является линейной гамильтоновой системой. В этом случае матрицу системы можно представить в виде

$$A(t) = JB(t),$$

где  $J$  – единичная симплектическая матрица, а матрица  $B^+ = B$  эрмитова.

♦ Примером линейных гамильтоновых систем является система в вариациях

$$\dot{a} = J\mathcal{H}'_{zz}a, \quad (23.13)$$

где  $\mathcal{H}_{zz} - 2n \times 2n$ -матрица вторых производных от функции Гамильтона, поэтому все результаты к системам в вариациях.

◆ Решения системы (23.13) называются *сопряженными друг другу*, если их кососкалярное произведение не равно нулю:

$$\{a_1, a_2\} = \langle a_2, Ja_1 \rangle \neq 0.$$

◇ Не уменьшая общности, будем считать, что кососкалярное произведение двух сопряженных векторов равно единице.

### Свойства решения системы в вариациях с периодическими коэффициентами

**Свойство 23.1.** Если гамильтониан классической системы не зависит от времени явно  $E = \mathcal{H}(z)$ , то векторы  $\dot{Z}(t)$ ,  $\partial Z/\partial E$  являются сопряженными решениями системы в вариациях

$$\left\{ \dot{Z}(t), \frac{\partial Z}{\partial E} \right\} = 1. \quad (23.14)$$

**Доказательство.** Пусть  $z = Z(t, \alpha)$  – некоторое решение системы Гамильтона

$$\dot{z} = J\mathcal{H}_z(z). \quad (23.15)$$

Продифференцировав уравнение (23.15) по времени, получим

$$\ddot{z} = J\mathcal{H}_{zz}(t)\dot{z},$$

т.е.  $a = \dot{Z}$  – решение системы в вариациях. Продифференцируем уравнение (23.15) по параметру  $\alpha$ :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial Z}{\partial \alpha} = J\mathcal{H}_{zz} \frac{\partial Z}{\partial \alpha},$$

т.е. производная от системы Гамильтона по параметру является решением системы в вариациях; в частности, можно положить  $\alpha = E$ .

Соотношение  $E = \mathcal{H}(z)$  продифференцируем по  $E$ :

$$1 = \left\langle \mathcal{H}_z, \frac{\partial Z}{\partial E} \right\rangle = \left\langle (-J\dot{Z}), \frac{\partial Z}{\partial E} \right\rangle = \left\langle \dot{Z}, J \frac{\partial Z}{\partial E} \right\rangle = \left\{ \dot{Z}, \frac{\partial Z}{\partial E} \right\}.$$

**Свойство 23.2 (теорема Ляпунова–Пуанкаре).** Характеристическое уравнение

$$\det[X(T) - \rho \mathbb{I}_{2n \times 2n}] = 0 \quad (23.16)$$

для линейной гамильтоновой системы (системы в вариациях) является возвратным, т.е. если  $\rho$  – корень характеристического уравнения, то  $\rho^{-1}$  – также его корень.

**Доказательство.** Пусть  $a_k(t)$  – некоторое решение Флоке системы в вариациях с показателем  $\rho_k$ , а  $a_{k+n}(t)$  – сопряженные ему решения Флоке. Тогда их кососкалярное произведение отлично от нуля  $\{a_k(t), a_{k+n}(t)\} = \text{const} \neq 0$ . По определению, для решений Флоке справедливо

$$\{a_k(t+T), a_{k+n}(t+T)\} = \rho_k \rho_{k+n} \{a_k(t), a_{k+n}(t)\}.$$

Поскольку кососкалярное произведение от времени не зависит, то  $\rho_k \rho_{k+n} = 1$ , что и требовалось доказать.

**Свойство 23.3.** Любые два решения Флоке

$$a_k(t + T) = \rho_k a_k(t), \quad k = \overline{1, m}, \quad m \leq n,$$

а также присоединенные к ним векторы

$$\tilde{a}_k(t + T) = \rho \tilde{a}_k(t) + \tilde{a}_{k-1}(t)$$

косоортогональны.

**Доказательство** непосредственно следует из условия

$$\{a_k(t + T), a_j(t + T)\} = \{a_k(t), a_j(t)\}.$$

**Свойство 23.4.** Пусть  $a(t)$  – решение системы в вариациях с периодическими коэффициентами, тогда

$$\lim_{t \rightarrow \infty} a(t) \neq 0.$$

**Доказательство** непосредственно следует из свойства 3:

$$a(t) = \sum_{k=1}^{2n} c_k a_k(t) = \sum_{k=1}^{2n} c_k e^{\beta_k t} \tilde{a}_k,$$

где  $\tilde{a}_k$  периодические.

♦ Классическая траектория  $Z(t + T) = Z(t)$  называется *устойчивой в линейном приближении*, если её матрица монодромии не имеет присоединенных векторов и все её показатели Флоке вещественны:  $\rho_k = e^{i\Omega_k T}$ .

## 24. Квазиклассическая асимптотика систем обыкновенных дифференциальных уравнений

Рассмотрим систему обыкновенных дифференциальных уравнений с малым параметром при производной

$$i\hbar \dot{\vec{x}} = A(t)\vec{x}, \quad \vec{x} \in \mathbb{C}^n, \tag{24.1}$$

где  $A(t)$  – квадратная матрица с непрерывными коэффициентами, такая что  $A^+ = A$ , т.е. эрмитова.

Решение системы (24.1) будем искать в виде

$$\vec{x}(t) = e^{iS(t)/\hbar} [\vec{f}^{(0)}(t) + \hbar \vec{f}^{(1)}(t) + \dots]. \tag{24.2}$$

Подставив (24.2) в (24.1), получим

$$(-\dot{S}\vec{f} + i\hbar \dot{\vec{f}}) e^{iS/\hbar} = A(t) e^{iS/\hbar} \vec{f},$$

где

$$\vec{f} = \vec{f}^{(0)}(t) + \hbar \vec{f}^{(1)}(t) + \dots$$

Приравняем коэффициенты при одинаковых степенях  $\hbar$ :

$$\begin{aligned} -\dot{S}\vec{f}^{(0)} &= A(t)\vec{f}^{(0)}, \\ [\dot{S} + A(t)]\vec{f}^{(1)} &= i\dot{\vec{f}}^{(0)}, \\ [\dot{S} + A(t)]\vec{f}^{(2)} &= i\dot{\vec{f}}^{(1)}, \\ &\dots \end{aligned} \tag{24.3}$$

Чтобы решить первое уравнение, рассмотрим для матрицы  $A(t)$  задачу на собственные значения

$$A(t)\vec{v}_k = \lambda_k(t)\vec{v}_k, \quad (24.4)$$

собственные векторы  $\vec{v}_k$  будем считать нормированными:

$$(\vec{v}_k^+, \vec{v}_k) = 1.$$

Первое уравнение системы (24.3) обращается в тождество, если

$$-\dot{S} = \lambda_k(t), \quad \vec{f}^{(0)}(t) = \sigma(t)\vec{v}_k(t), \quad k = \overline{1, n},$$

где  $\sigma(t)$  — некоторая скалярная функция. При этом возможны следующие частные случаи.

а)  $\lambda_k(t)$  — невырожденное собственное значение матрицы  $A(t)$ . Тогда

$$S(t) = - \int_0^t \lambda_k(\tau) d\tau,$$

и второе уравнение в (24.3) примет вид

$$[A(t) - \lambda_k(t)]\vec{f}_k^{(1)} = i\dot{\vec{f}}_k^{(0)}. \quad (24.5)$$

Чтобы эта система уравнений имела единственное решение, необходимо выполнение условия

$$\det[A(t) - \lambda_k(t)] \neq 0,$$

что невозможно, так как  $\lambda_k$  — собственные значения матрицы  $A(t)$ . Поэтому система уравнений (24.5) будет совместна, если ее правая часть удовлетворяет дополнительному условию  $(\vec{v}_k^+, i\dot{\vec{f}}_k^{(0)}) = 0$ , т.е. она ортогональна вектору  $\vec{v}_k$ . Распишем

$$i(\vec{v}_k^+, [\dot{\sigma}\vec{v}_k + \sigma\dot{\vec{v}}_k]) = 0$$

или

$$\dot{\sigma} + \sigma(\vec{v}_k^+, \dot{\vec{v}}_k) = 0.$$

Тогда

$$\sigma(t) = \exp \left\{ - \int_0^t (\vec{v}_k^+, \dot{\vec{v}}_k) dt \right\}.$$

С учетом соотношения  $2\operatorname{Re}(\vec{v}^+, \dot{\vec{v}}) = 0$ , которое непосредственно следует из  $\dot{\vec{v}}^+ \vec{v} + \vec{v}^+ \dot{\vec{v}} = 0$ , полученного дифференцированием условия нормировки  $\vec{v}^+ \vec{v} = 1$ , запишем

$$\sigma(t) = \exp \left\{ -2i \int_0^t \operatorname{Im}(\vec{v}_k^+(t), \dot{\vec{v}}_k(t)) dt \right\}.$$

Итак, вектор

$$\vec{f}_k^{(0)}(t) = \vec{v}_k(t) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \lambda_k(t) dt - 2i \int_0^t \operatorname{Im} \vec{v}_k^+ \dot{\vec{v}}_k dt \right] \quad (24.6)$$

является главным членом асимптотики. Если в уравнении (24.5) он имеет именно такой вид, то это уравнение разрешимо. Обозначим через  $\vec{\varphi}_k(t)$  частное решение системы (24.5), удовлетворяющее условию ортогональности  $(\vec{v}_k^+, \vec{\varphi}_k) = 0$ . Для последующего члена асимптотики получим

$$\vec{f}_k^{(1)}(t) = \vec{\varphi}_k(t) + \sigma_1(t)\vec{v}_k(t),$$

где  $\sigma_1$  — произвольная скалярная функция. Она определяется из условия разрешимости уравнения

$$[A(t) - \lambda_k(t)]f_k^{(2)}(t) = i\dot{f}_k^{(1)}(t).$$

Таким способом находятся асимптотические решения системы (24.1) при условии, что собственные значения  $\lambda_k(t)$  матрицы  $A(t)$  невырождены.

Обозначим

$$\gamma_k(t) = -2 \int_0^t \text{Im}(\vec{v}_k^+, \dot{\vec{v}}_k) dt$$

и перепишем уравнение (24.6):

$$\vec{f}_k^{(0)}(t) = \vec{v}_k(t) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \lambda_k(t) dt + i\gamma_k \right].$$

б)  $\lambda_k(t)$  вырождены.

Пусть  $\lambda_k(t)$  — собственное значение  $A(t)$  кратности  $m$ .

◇ Мы предполагаем, что кратность собственных значений  $\lambda_k(t)$  не зависит от  $t$ . Случай систем с характеристиками переменной кратности требует специального рассмотрения и более сложного математического аппарата.

Будем предполагать, что для собственных значений  $\lambda_k^{(m)}$  можно построить  $m$  ортонормированных собственных векторов  $\vec{u}_k^{(1)}, \vec{u}_k^{(2)}, \dots, \vec{u}_k^{(m)}$ :

$$[\vec{u}_k^{(m)}]^+ \vec{u}_l^{(j)} = \delta_{kl} \delta_{mj}.$$

Тогда

$$S(t) = - \int_0^t \lambda_k^{(m)}(t) dt, \quad (24.7)$$

$$\vec{f}_k^{(0)}(t) = u_1(t)\vec{v}_k^{(1)} + \dots + u_m(t)\vec{v}_k^{(m)},$$

где  $u_1(t), \dots, u_m(t)$  — скалярные функции, образующие линейные комбинации векторов  $\vec{v}_k^{(i)}$ .

Составим  $m \times n$ -матрицу

$$\Pi(t) = (\vec{v}_k^{(1)}, \dots, \vec{v}_k^{(m)}). \quad (24.8)$$

Тогда для главного члена асимптотики запишем

$$f_k^{(0)} = \Pi(t)u(t), \quad (24.9)$$

где  $u(t) \in \mathbb{C}^m$  —  $m$ -мерный вектор. Для определения  $f_k^{(1)}(t)$  воспользуемся системой уравнений (24.4), которая разрешима, если ее правая часть ортогональна всем собственным векторам, отвечающим собственному значению  $\lambda_k$ , т.е.

$$([\vec{v}_k^{(j)}]^+, i\dot{f}_k^{(0)}) = 0, \quad j = \overline{1, m}.$$

Воспользовавшись (24.9), можно получить условие разрешимости системы (24.5):

$$\Pi^+ \dot{f}_k^{(0)}(t) = 0 \quad (24.10)$$

или



$$\Pi^+(t)[\dot{\Pi}(t)u + \Pi(t)\dot{u}] = 0.$$

Окончательно запишем

$$\dot{u} + M(t)u = 0, \quad (24.11)$$

где

$$M(t) = \Pi^+(t)\dot{\Pi}(t). \quad (24.12)$$

Можно показать, что матрица  $M(t)$  косоэрмитова, т.е.  $M^+ = -M$ .

◆ Матрица  $M(t)$  (24.12) называется *матрицей поляризации*, а уравнение (24.11) — *уравнением поляризации*.

Если вектор-функция  $u(t)$  удовлетворяет уравнению (24.11), то первая поправка к главному члену асимптотики имеет вид

$$\vec{f}_k^{(1)}(t) = \vec{\varphi}_k^{(1)}(t) + \Pi(t)u^{(1)}(t),$$

где  $\vec{\varphi}_k^{(1)}$  — частное решение системы (24.5), удовлетворяющее условию  $\Pi^+(t)\vec{\varphi}_k^{(1)}(t) = 0$ ;  $u^{(1)}(t) \in \mathbb{C}^m$  — произвольный  $m$ -мерный вектор, который определяется из условия существования следующей поправки  $f_k^{(2)}(t)$ .

◇ Можно показать, что ряд (24.2) является асимптотикой некоторого решения системы (24.1). Для этого нужно оценить модуль разности точного и асимптотического решений. На конечном временном промежутке  $t \in [0, T]$  такая оценка может быть получена аналогично тому, как это делалось ранее.

Рассмотрим квантовую систему, имеющую конечное число степеней свободы  $n$ . Тогда уравнение Шрёдингера будет иметь вид

$$i\frac{d}{dt}\vec{\Psi} = A(R)\vec{\Psi}, \quad \hbar = 1. \quad (24.13)$$

Так как число степеней свободы конечно, гамильтониан системы представляет собой матрицу  $\hat{\mathcal{H}} = A_m(R)$ , зависящую от набора параметров  $R = (R_1, R_2, \dots, R_N)$ . Будем считать, что  $R_i$ ,  $i = \overline{1, N}$ , медленно меняются со временем:

$$R = R(\varepsilon t); \quad \varepsilon \rightarrow 0.$$

Состояние квантовой системы также зависит от времени и определяется уравнением

$$i\frac{d}{dt}\vec{\Psi} = A(R(\varepsilon t))\vec{\Psi}. \quad (24.14)$$

Сделаем в (24.14) замену переменных  $\varepsilon t = \tau$ :

$$i\varepsilon\frac{d\vec{\Psi}}{d\tau} = A(R(\tau))\vec{\Psi}. \quad (24.15)$$

В результате приходим к задаче (24.1), если переобозначить  $\varepsilon \rightarrow \hbar$ ,  $\tau \rightarrow t$ ,  $\vec{\Psi} \rightarrow \vec{v}$ .

**Следствие.** Если поставить для  $\vec{\Psi}$  начальные условия

$$\vec{\Psi}|_{\tau=0} = \vec{v}_k(\tau_0), \quad (24.16)$$

$\vec{v}_k$  — собственные векторы матрицы  $A(\tau) = A(R(\tau))$ , отвечающие  $\lambda_k(\tau)$ , то с точностью до  $O(\varepsilon^2)$  решение задачи Коши (24.15), (24.16) также будет собственным вектором матрицы  $A(\tau)$ , что и составляет содержание квантовой адиабатической теоремы

$$\vec{\Psi}_k(\tau) = \vec{v}_k(\tau) \exp\left[-\frac{i}{\varepsilon} \int_0^\tau \lambda_k(t) d\tau + i\gamma_k(\tau)\right]. \quad (24.17)$$

Видно, что фазовый множитель состоит из двух частей. Величина

$$-\frac{i}{\varepsilon} \int_0^{\tau} \lambda_k(t) dt$$

называется динамической частью фазы. Вплоть до восьмидесятых годов считалось, что только она и определяет набег фаз. Слагаемое  $i\gamma_k(\tau)$  обнаружено в восьмидесятых годах Берри и названо фазой Берри (или геометрической частью фазы).

## 25. Конструкция квазиэнергетических спектральных серий оператора Шрёдингера, отвечающих устойчивым циклическим движениям классической системы

Рассмотрим квантовомеханическую систему, гамильтониан которой описывается произвольным упорядоченным по Вейлю скалярным  $\hbar^{-1}$ -псевдодифференциальным оператором ( $\hbar^{-1}$ -ПДО)  $\widehat{\mathcal{H}}(t) = \mathcal{H}(\widehat{\vec{p}}, \vec{x}, t, \hbar)$ ,  $\vec{x} \in \mathbb{R}_x^n$  и, кроме того, является  $T$ -периодической функцией времени:  $\widehat{\mathcal{H}}(t+T) = \widehat{\mathcal{H}}(t)$ . Волновая функция такой системы удовлетворяет уравнению Шрёдингера

$$(-i\hbar\partial_t + \widehat{\mathcal{H}}(t))\Psi(\vec{x}, t, \hbar) = 0. \quad (25.1)$$

Зельдовичем и Ритусом (см. [7] и обзор [13]) впервые был выделен важный класс решений уравнения (25.1) – квазиэнергетические состояния  $\Psi_{\mathcal{E}}(\vec{x}, t, \hbar)$ , которые могут быть представлены в виде

$$\Psi_{\mathcal{E}}(\vec{x}, t, \hbar) = e^{-i\varepsilon t/\hbar} \varphi_{\mathcal{E}}(\vec{x}, t, \hbar), \quad (25.2)$$

где

$$\varphi_{\mathcal{E}}(\vec{x}, t+T, \hbar) = \varphi_{\mathcal{E}}(\vec{x}, t, \hbar). \quad (25.3)$$

Величина  $\mathcal{E}$ , входящая в (25.2), называется квазиэнергией и определена по модулю  $\hbar\omega$  ( $\omega = 2\pi/T$ ), т.е.  $\mathcal{E}' = \mathcal{E} + m\hbar\omega$ ,  $m \in \mathbb{Z}$ . Состояния такого типа играют ключевую роль при описании квантовомеханических систем, находящихся под влиянием сильных периодических внешних воздействий, когда стандартные методы нестационарной теории возмущений оказываются неприемлемыми [7].

Квазиэнергетические состояния (25.2) являются частным случаем циклических состояний, введенных Аароновым и Анандом (см., например, [13, 44]). Под циклической эволюцией квантовой системы на временном интервале  $[0, T]$  понимается следующее: вектор состояния  $\Psi(t)$  имеет вид

$$\Psi(t) = e^{if(t)}\varphi(t), \quad t \in [0, T], \quad (25.4)$$

где

$$f(T) - f(0) = \phi \pmod{2\pi}, \quad (25.5)$$

$$\varphi(T) = \varphi(0). \quad (25.6)$$

При этом полная фаза  $\phi$  волновой функции (25.4) разбивается на два слагаемых: динамическую фазу

$$\delta = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T dt \frac{\langle \Psi(t) | \widehat{\mathcal{H}} | \Psi(t) \rangle}{\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle} \quad (25.7)$$

и геометрическую фазу Ааронова–Ананда

$$\gamma = i \int_0^T dt \frac{\langle \varphi(t) | \dot{\varphi}(t) \rangle}{\langle \varphi(t) | \varphi(t) \rangle}. \quad (25.8)$$

Сравнив (25.2) и (25.4), получим, что для квазиэнергетических состояний

$$f(t) = -\mathcal{E}t/\hbar, \quad (25.9)$$

а для полной фазы  $\phi$ , согласно (25.5), имеем

$$\phi = -\mathcal{E}T/\hbar \pmod{2\pi}. \quad (25.10)$$

В силу (25.7)–(25.10) фаза Ааронова–Ананда  $\gamma_{\mathcal{E}}$ , отвечающая данному квазиэнергетическому состоянию  $\Psi_{\mathcal{E}}(\vec{x}, t, \hbar)$ , может быть определена по формуле

$$\gamma_{\mathcal{E}} = -\frac{\mathcal{E}T}{\hbar} + \frac{1}{\hbar} \int_0^T dt \frac{\langle \Psi_{\mathcal{E}} | \widehat{\mathcal{H}}(t) | \Psi_{\mathcal{E}} \rangle}{\langle \Psi_{\mathcal{E}} | \Psi_{\mathcal{E}} \rangle} \pmod{2\pi}. \quad (25.11)$$

Среди решений уравнения (25.1), удовлетворяющих условию квазипериодичности (25.2), можно выделить семейство квазиклассических асимптотик  $\Psi_{\mathcal{E}\nu}$  со следующими свойствами:

1)  $\Psi_{\mathcal{E}\nu}(\vec{x}, t, \hbar)$  являются приближенными по  $\text{mod } O(\hbar^{5/2})$  решениями уравнения (25.1). Последнее означает, что

$$\begin{aligned} (-i\hbar\partial_t + \widehat{\mathcal{H}}(t))\Psi_{\mathcal{E}\nu}(\vec{x}, t, \hbar) &= v_{\nu}(\vec{x}, t, \hbar), \\ \max_{t \in [0, T]} \|v_{\nu}(\vec{x}, t, \hbar)\|_{L_2(\mathbb{R}_q^n)} &= O(\hbar^{5/2}). \end{aligned} \quad (25.12)$$

2) Решение  $\Psi_{\mathcal{E}\nu}$  приближает соответствующее точное решение  $\Psi$  задачи Коши  $\Psi|_{t=0} = \Psi_{\mathcal{E}\nu}(\vec{x}, 0, \hbar)$  с точностью до  $O(\hbar^{3/2})$ . Иными словами, на временном интервале  $[0, T]$  справедлива оценка

$$\|\Psi(\vec{x}, t, \hbar) - \Psi_{\mathcal{E}\nu}(\vec{x}, t, \hbar)\|_{L_2(\mathbb{R}_q^n)} = O(\hbar^{3/2}). \quad (25.13)$$

3) При каждом  $t \in [0, T]$  решения (25.12) образуют полный ортонормированный с точностью до  $O(\hbar^{3/2})$  набор в пространстве состояний квантовой системы (25.1)

$$\langle \Psi_{\mathcal{E}\nu'} | \Psi_{\mathcal{E}\nu} \rangle = \delta_{\nu\nu'} + O(\hbar^{3/2}). \quad (25.14)$$

4) Функции  $\Psi_{\mathcal{E}\nu}$  имеют вид волновых пакетов, сосредоточенных в окрестности заданной  $T$ -периодической классической траектории. Такие состояния, если они существуют, будем называть квазиэнергетическими траекторно-когерентными состояниями.

Главный член  $\Psi_{\mathcal{E}\nu}$  квазиклассических ТКС является асимптотическим по  $\text{mod } O(\hbar^{3/2})$  решением уравнения (25.1). В основе его построения лежит теория комплексного роста Маслова [30, 32]. Опишем кратко алгоритм построения таких решений.

Пусть  $z = Z(t, \hbar) = (\vec{P}(t, \hbar), \vec{X}(t, \hbar))$  — некоторая фиксированная замкнутая фазовая траектория системы Гамильтона–Эренфеста (20.18)

$$\dot{z} = J\partial_z \mathcal{H}(z, t) + \frac{1}{2} \langle \partial_z, \Delta_2 \partial_z \rangle J\partial_z \mathcal{H}(z, t), \quad Z(t+T) = Z(t) \quad (25.15)$$

$$\begin{aligned} \dot{\Delta}_2 &= J\mathcal{H}''_{zz}(z, t)\Delta_2 - \Delta_2\mathcal{H}''_{zz}(z, t)J, \\ \Delta_2^T &= \Delta_2, \quad \Delta_2(t+T) = \Delta_2(t), \end{aligned} \quad (25.16)$$

где  $\Delta_2 = \|\Delta_{a_1 a_2}\|_{2n \times 2n}$  – неотрицательно определенная матрица. Предположим, что система в вариациях, отвечающая функции Гамильтона  $\mathcal{H}(z, t)$  и  $T$ -периодической фазовой траектории  $z = Z(t, \hbar)$ ,

$$\dot{a} = J\mathcal{H}_{zz}(t)a \quad (25.17)$$

допускает набор из  $n$ ,  $n = \dim \mathbb{R}_q^n$ , комплексных линейно независимых решений Флоке  $a_k(t) = (\vec{W}_k(t), \vec{Z}_k(t))^\top$ :

$$a_k(t+T) = e^{i\Omega_k T} a_k(t), \quad \text{Im } \Omega_k = 0, \quad (25.18)$$

которые будем нормировать условием

$$\{a_k(t), a_l(t)\} = 0, \quad \{a_k(t), a_l^*(t)\} = 2i\delta_{kl}, \quad k, l = \overline{1, n}. \quad (25.19)$$

Подчеркнем, что в рамках теории Флоке для линейных гамильтоновых систем с периодическими коэффициентами условия (25.18) означают устойчивость фазовой траектории  $z(t)$  в линейном приближении. Напомним, что  $2n$ -мерные векторы  $a_k(t)$  и  $a_k^*(t)$ ,  $k = \overline{1, n}$ , образуют симплектический базис в  $\mathbb{C}_{W,Z}^{2n}$ , а  $n$ -мерная комплексная плоскость  $r^n(z(t))$ , натянутая на векторы  $a_k(t)$ , образует комплексный росток на  $z(t)$  [32].

Разложим оператор  $\hat{\mathcal{H}}(t)$  в ряд Тейлора в окрестности кривой  $z(t)$  по операторам  $\Delta \hat{p}$  и  $\Delta \vec{x}$  до 2-го порядка включительно:

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}}_0(t) + \hat{\mathcal{H}}_1(t). \quad (25.20)$$

Поскольку для остаточного члена  $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$  ряда Тейлора (25.20) справедлива оценка  $\hat{\mathcal{H}}_1(t) = \hat{O}(\hbar^{3/2})$ , получаем с использованием (15.8), что функции (11.5) являются приближенными по  $\text{mod } O(\hbar^{3/2})$  решениями уравнения (25.1).

В дальнейшем нам также потребуется ряд фактов, вытекающих из предыдущих конструкций. Так, разрешив (11.4) относительно операторов  $\Delta \hat{p}$  и  $\Delta \vec{x}$ , получим (см. (11.13))

$$\begin{aligned} \Delta \hat{p} &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} [B^*(t)\hat{a} - B(t)\hat{a}^+], \\ \Delta \vec{x} &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} [C^*(t)\hat{a} - C(t)\hat{a}^+], \end{aligned} \quad (25.21)$$

где  $\hat{a}^+ = (\hat{a}_1^+, \dots, \hat{a}_n^+)^\top$ ,  $\hat{a} = (\hat{a}_1, \dots, \hat{a}_n)^\top$ . Кроме того, учитывая (25.19), нетрудно проверить (см. (10.7) и (10.8)), что

$$\begin{aligned} C^+(t)B(t) - B^+(t)C(t) &= 2i\mathbb{I}, & C^\top(t)B(t) - B^\top(t)C(t) &= 0, \\ C^*(t)C^\top(t) - C(t)C^+(t) &= 0, & B^*(t)B^\top(t) - B(t)B^+(t) &= 0, \end{aligned} \quad (25.22)$$

Решения уравнения

$$[-i\hbar\partial_t + \hat{\mathcal{H}}_0(t)]\sqrt{\hbar}\varphi_\nu^{(1)} = 0 \quad (25.23)$$

определяются выражением (11.6).

Из условия периодичности (25.15) и (25.16) решений системы Гамильтона и квазипериодичности (25.24) решений системы в вариациях следует

$$\begin{aligned} \hat{a}_k(t+T) &= e^{i\Omega_k T} \hat{a}_k(t), & \hat{a}(t) &= N_a \langle a(t), J\Delta \hat{z} \rangle \quad k = \overline{1, n}, \\ \left[ \hat{a}^+(t+T) \right]^\nu &= \exp \left[ -i \sum_{k=1}^n T\Omega_k \nu_k \right] \left[ \hat{a}^+(t) \right]^\nu, \end{aligned} \quad (25.24)$$

$$\det C(t+T) = \exp \left[ i \sum_{k=1}^n T \Omega_k \nu_k \right] \det C(t), \quad Q(t+T) = Q(t).$$

Из соотношения (11.6) вытекает

$$|0, t\rangle = |0, t, \Psi_0\rangle = \frac{N_{\hbar}}{\det C(t)} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ S(t, \hbar) + \langle \vec{P}(t, \hbar), \Delta \vec{x} \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta \vec{x}, Q(t) \Delta \vec{x} \rangle \right] \right\}, \quad (25.25)$$

$$S(t, \hbar) = \int_0^t \left\{ \langle \vec{P}(t, \hbar), \dot{\vec{X}}(t, \hbar) \rangle - \mathcal{H}(Z(t, \hbar), t) \right\} dt. \quad (25.26)$$

где  $N_{\hbar}$  – нормировочный множитель, определяющего вакуумное траекторно-когерентное состояние (ТКС).

Следуя (11.6), определим набор функций  $|\nu, t\rangle$  как результат действия операторов «рождения»  $\hat{a}_j^+(t)$  на состояние  $|0, t\rangle$  (25.25):

$$|\nu, t\rangle = \frac{1}{\sqrt{\nu!}} [\hat{a}^+(t)]^{\nu} |0, t\rangle = \prod_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{\nu_j!}} [\hat{a}_j^+(t)]^{\nu_j} |0, t\rangle, \quad (25.27) \\ \nu = (\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_n) \in \mathbb{Z}_+^n, \quad \hat{a}^+(t) = (\hat{a}_1^+(t), \dots, \hat{a}_n^+(t)).$$

Из условий квазипериодичности (25.24) следует

$$|\nu, t+T\rangle = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \mathcal{E}_{\nu}^{(2)} T \right\} |\nu, t\rangle, \quad (25.28)$$

где

$$\mathcal{E}_{\nu}^{(2)}(\text{mod } \omega) = -\frac{1}{T} S(T, \hbar) + \hbar \sum_{k=1}^n \Omega_k \left( \nu_k + \frac{1}{2} \right), \quad (25.29)$$

$$S(T, \hbar) = \int_0^T \left\{ \langle \vec{P}(t, \hbar), \dot{\vec{X}}(t, \hbar) \rangle - \mathcal{H}(Z(t, \hbar), t) \right\} dt. \quad (25.30)$$

Функции  $|\nu, t\rangle$ ,  $\nu \in \mathbb{Z}_+^n$ , образуют фоковский базис решений уравнения (25.23).

Проинтегрируем первое слагаемое в соотношении (25.30) один раз по частям, получим

$$\int_0^T \langle \vec{P}(t, \hbar), \dot{\vec{X}}(t, \hbar) \rangle dt = \frac{1}{2} \int_0^T \left[ \langle \vec{P}(t, \hbar), \dot{\vec{X}}(t, \hbar) \rangle - \langle \dot{\vec{P}}(t, \hbar), \vec{X}(t, \hbar) \rangle \right] dt = \\ = \frac{1}{2} \int_0^T \{ Z(t, \hbar), \dot{Z}(t, \hbar) \} dt.$$

С учётом разложения (20.20) из (25.30), получим

$$S(T) = \int_0^T \left[ \frac{1}{2} \{ Z_0(t), \dot{Z}_0(t) \} + \frac{\hbar}{2} \{ Z_1(t), \dot{Z}_0(t) \} + \frac{\hbar}{2} \{ Z_0(t), \dot{Z}_1(t) \} - \right.$$

$$-\mathcal{H}(Z_0(t)) - \hbar\{Z_1(t), \dot{Z}_0(t)\} \Big] dt + O(\hbar^{3/2}). \quad (25.31)$$

Здесь мы учли, что

$$\langle Z_1(t), \partial_z \mathcal{H}(z, t) \rangle = \{Z_1(t), \dot{Z}_0(t)\}.$$

Интеграл от полной производной периодической функции за период равен нулю, поэтому выражение (25.31) можно записать в виде

$$S(T) = - \int_0^T \left[ \frac{1}{2} \{ \dot{Z}_0(t), Z_0(t) \} + \mathcal{H}(Z_0(t)) \right] dt + O(\hbar^{3/2}). \quad (25.32)$$

Подставив (26.9), (26.11), (26.13) в (25.29), запишем

$$\mathcal{E}_\nu^{(2)} = \frac{1}{T} \int_0^T \left[ \frac{1}{2} \{ \dot{Z}_0(t), Z_0(t) \} + \mathcal{H}(Z_0(t)) + \hbar \sum_{k=1}^n \Omega_k \left( \nu_k + \frac{1}{2} \right) \right] dt + O(\hbar^{3/2}). \quad (25.33)$$

## 26. Фаза Ааронова–Ананда

Перейдем к вычислению фазы Ааронова–Ананда, отвечающей квазиэнергетическим состояниям (25.27). С этой целью воспользуемся формулой (25.11), из которой, пренебрегая слагаемыми, имеющими порядок  $O(\hbar^{1/2})$ , имеем

$$\gamma_{\mathcal{E}_\nu} = -\frac{\mathcal{E}_\nu T}{\hbar} + \frac{1}{\hbar} \int_0^T dt \left\{ \mathcal{H}(t) + \frac{1}{2} \text{Sp} \left( \mathcal{H}_{zz}(t) \Delta_2(t) \right) \right\}. \quad (26.1)$$

С помощью свойств системы в вариациях нетрудно показать, что

$$\begin{aligned} \text{Sp} \left( \mathcal{H}_{zz}(t) \Delta_2(t) \right) &= \frac{\hbar}{2} \text{Sp Re} \left[ \dot{C}(t) D_\nu^{-1} B^+(t) - \dot{B}(t) D_\nu^{-1} C^+(t) \right] = \\ &= -\hbar \text{Re} \sum_{k=1}^n \left( \nu_k + \frac{1}{2} \right) \{ \dot{a}_k(t), a_k^*(t) \}, \end{aligned} \quad (26.2)$$

где в нашем случае  $D_\nu^{-1} = \text{diag}(2\nu_1 + 1, \dots, 2\nu_n + 1)$ . Заметим, что величина, стоящая под знаком суммы в правой части (26.2), в силу (25.22) является вещественной. Следовательно, знак  $\text{Re}$  можно опустить. Обозначим через  $a_0(t) = \dot{Z}_0(t)$ , где  $Z(t, \hbar) = Z_0(t) + \hbar Z_1(t) + O(\hbar^{3/2})$  определены в (20.20). Тогда, подставив в (26.1) явное выражение для квазиэнергий  $\mathcal{E}_\nu$  (25.33) и используя соотношение (26.2), находим

$$\begin{aligned} \gamma_{\mathcal{E}_\nu} &= \frac{1}{\hbar} \int_0^T dt \langle \vec{P}(t), \dot{\vec{X}}(t) \rangle - \int_0^T dt \{ \dot{Z}_0(t), \hbar Z_1(t) \} - \\ &\quad - \sum_{k=1}^n \left( \nu_k + \frac{1}{2} \right) \left[ T \Omega_k + \frac{1}{2} \int_0^T dt \{ \dot{a}_k(t), a_k^*(t) \} \right]. \end{aligned} \quad (26.3)$$

Если теперь вместо решений Флоке ввести  $T$ -периодические вектор-функции

$$\tilde{a}_k(t) = e^{-i\Omega_k t} a_k(t), \quad \tilde{a}_k(t+T) = \tilde{a}_k(t), \quad (26.4)$$

то формула (26.3) примет вид

$$\begin{aligned} \gamma_{\mathcal{E}_\nu} &= \frac{1}{\hbar} \int_0^T dt \langle \vec{P}(t), \dot{\vec{X}}(t) \rangle - \int_0^T dt \{a_0(t), \hbar Z_1(t)\} - \\ &- \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \left( \nu_k + \frac{1}{2} \right) \left[ \int_0^T dt \{ \dot{\tilde{a}}_k(t), \tilde{a}_k^*(t) \} \right]. \end{aligned} \quad (26.5)$$

Из уравнений Гамильтона-Эренфеста второго порядка (25.16) в приближении малых дисперсий движения для вектора  $Z_1(t)$  получим

$$\dot{z}_1 = J\mathcal{H}_{zz}(t)z_1 + \frac{1}{2\hbar} F^{(\nu)}(t), \quad (26.6)$$

где

$$F^{(\nu)}(t) = J\partial_z \text{Sp} \left\{ \mathcal{H}_{zz}(z, t) \Delta_2 \right\} \Big|_{z=Z_0(t)}. \quad (26.7)$$

С учетом равенств (20.26) вектор  $F^{(\nu)}(t)$  может быть представлен в виде

$$F^{(\nu)}(t) = \left[ \partial_z \sum_{k=1}^n \left( \nu_k + \frac{1}{2} \right) \{ a_k^*(t), J\mathcal{H}_{zz}(z, t) a_k(t) \} \right] \Big|_{z=Z_0(t)}. \quad (26.8)$$

Заметим, что симплектическое произведение векторов в правой части (26.8) — вещественная величина.

Уравнение (26.6) есть линейная неоднородная гамильтонова система с  $T$ -периодическими коэффициентами. Ее общее решение имеет вид

$$\hbar Z_1(t) = \text{Re} \left[ \sum_{k=1}^n a_k(t) \left( \frac{1}{2i} \int_0^t d\tau \{ F^{(\nu)}(\tau), a_k^*(\tau) \} + B_{(\nu)k} \right) \right]. \quad (26.9)$$

Входящие сюда константы интегрирования  $B_{(\nu)k}$  определим из условия периодичности функции  $\hbar Z_1(t)$  во времени, т.е.

$$\hbar Z_1(t+T) = \hbar Z_1(t). \quad (26.10)$$

Аналогично (20.25) положим

$$b_k^{(\nu)}(t) = \frac{1}{2i} \int_0^t d\tau \{ F_k^{(\nu)}(\tau), a_k^*(\tau) \}. \quad (26.11)$$

Тогда условие (26.10) означает, что

$$e^{i\Omega_k T} [b_k^{(\nu)}(t+T) + B_k^{(\nu)}] = b_k^{(\nu)}(t) + B_k^{(\nu)}. \quad (26.12)$$

Заметим, что

$$\begin{aligned} b_k^{(\nu)}(t+T) &= \frac{1}{2i} \int_0^{t+T} d\tau \{ F^{(\nu)}(\tau), a_k^*(\tau) \} = b_k^{(\nu)}(T) + \frac{1}{2i} \int_T^{t+T} d\tau \{ F^{(\nu)}(\tau), a_k^*(\tau) \} = \\ &= b_k^{(\nu)}(T) + \frac{1}{2i} \int_0^t d\tau \{ F_{(\nu)}(\tau+T), a_k^*(\tau+T) \} = b_k^{(\nu)}(T) + e^{-i\Omega_\nu T} b_k^{(\nu)}(t). \end{aligned}$$

Следовательно,

$$B_k^{(\nu)} = \frac{b_k^{(\nu)}(T)}{1 - e^{i\Omega_k T}}. \quad (26.13)$$

Подставив (26.9), (26.11), (26.13) в (26.5), получаем следующее выражение для фазы Ааронова–Ананда :

$$\begin{aligned} \gamma_{\varepsilon_\nu} = & \frac{1}{\hbar} \int_0^T dt \langle \vec{P}(t), \dot{\vec{X}}(t) \rangle - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \left( \nu_k + \frac{1}{2} \right) \int_0^T dt \{ \dot{\tilde{a}}_k, \tilde{a}_k^* \} - \\ & - \operatorname{Re} \int_0^T dt \frac{i}{2} \sum_{l=1}^n \{ a_0(t), a_l(t) \} \left[ \partial_z \sum_{k=1}^n \left( \nu_k + \frac{1}{2} \right) \times \right. \\ & \left. \times \int_0^t d\tau \{ a_k^*(\tau), \mathcal{H}_{zz}(z, \tau) a_k(t) \} \right] \Big|_{z=Z_0(\tau)} + \frac{b_k^{(\nu)}(T)}{1 - e^{i\Omega_k T}}. \end{aligned} \quad (26.14)$$

Таким образом, фаза Ааронова–Ананда  $\gamma_{\varepsilon_\nu}$ , отвечающая квазиэнергетическим ТКС  $\Psi_{\varepsilon_\nu}(\vec{x}, t, \hbar) = |\nu, t\rangle$  (25.27), полностью определяется двумя следующими геометрическими объектами: устойчивой в линейном приближении замкнутой фазовой траекторией  $z = Z(t)$  системы Гамильтона–Эренфеста и комплексным ростком  $r^n(Z(t))$ , образованным из  $n$  линейно независимых решений Флоке системы в вариациях (25.17).

## 27. Фаза Ааронова–Ананда в адиабатическом приближении

Предположим, что эволюция классической системы определяется гамильтонианом  $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{x}, R(t))$ , зависящим от времени через набор медленно меняющихся  $T$ -периодических функций  $R(t) = (R_1(t), \dots, R_N(t))$ . В этом случае получим адиабатическое приближение для величины  $\gamma_{\varepsilon_\nu}$ . Как следует из формулы (26.3), для этого требуется построить адиабатические решения уравнений (25.15), (25.17)

Начнем с построения адиабатического решения  $z(t) = Z(t) = (\vec{p}(t), \vec{x}(t))^T$  системы Гамильтона (25.15), удовлетворяющего условию

$$Z(t + T) = Z(t). \quad (27.1)$$

Для нахождения этого решения воспользуемся следующим стандартным приемом. Положим  $t = sT$ , где  $s$  играет роль безразмерного времени. Решение будем искать в виде формального<sup>9</sup> асимптотического ряда по параметру адиабатичности<sup>10</sup>  $1/T$

$$Z(t) = \overset{0}{Z}(s) + \frac{1}{T} \overset{1}{Z}(s) + O(T^{-2}). \quad (27.2)$$

<sup>9</sup>Фактическим безразмерным параметром адиабатического разложения является

$$\epsilon = \max_{j=1, N; l=1, n} \left\{ \frac{2\pi \dot{R}_j}{\Omega_l R_j} \right\},$$

где  $\Omega_j$  определен в (25.18).

<sup>10</sup>Проблема точности дупараметрической асимптотики слабо исследована в математической литературе. Этот вопрос сложен, так как используются два предельных перехода:  $T \rightarrow \infty$  и  $\hbar \rightarrow 0$ . Можно показать, что если  $T^{-1} \sim \hbar^\delta$ ,  $\delta > 1$ , разложение в ряд по  $T^{-1} \rightarrow 0$  не нарушает асимптотики по  $\hbar \rightarrow 0$ , поскольку квазиэнергетические асимптотики равномерны по  $t$ .



Подстановка (27.2) в (25.15) приводит к соотношению

$$\frac{1}{T} \overset{0}{Z}' = \begin{pmatrix} -\mathcal{H}_{\vec{x}}(s) \\ \mathcal{H}_{\vec{p}}(s) \end{pmatrix} + \frac{1}{T} \mathcal{H}_{\text{var}}(s) \overset{1}{Z} + O(T^{-2}), \quad (27.3)$$

где  $\mathcal{H}_{\vec{x}}(s) = \mathcal{H}_{\vec{x}}(\vec{p}, \vec{x}, \tilde{R}(s)) \Big|_{\substack{\vec{p}=\vec{p}(s) \\ \vec{x}=\vec{x}(s)}}$  и т.д.,  $\tilde{R}(s) = R(t)|_{t=sT}$ , а штрихом обозначена

производная по  $s$ . Отсюда в нулевом порядке по параметру адиабатичности  $1/T$  имеем

$$\mathcal{H}_{\vec{p}}(\vec{p}(s), \vec{x}(s), \tilde{R}(s)) = 0, \quad \mathcal{H}_{\vec{x}}(\vec{p}(s), \vec{x}(s), \tilde{R}(s)) = 0, \quad (27.4)$$

и, следовательно, вектор  $\overset{0}{Z}(s) = (\vec{p}(s), \vec{x}(s))^T$  определяет точку покоя функции  $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{x}, \tilde{R}(s))$  при каждом фиксированном значении  $s$ . Таким образом,

$$\overset{0}{\vec{p}}(s) = \vec{P}_0(\tilde{R}(s)) = \vec{P}_0(R(t)), \quad \overset{0}{\vec{x}}(s) = \vec{Q}_0(\tilde{R}(s)) = \vec{Q}_0(R(t)). \quad (27.5)$$

Очевидно, что в нулевом приближении условие периодичности (27.1) автоматически выполнено.

В первом приближении, согласно (27.3), получаем алгебраическую систему уравнений

$$\mathcal{H}_{\text{var}}(s) \overset{1}{Z} = \overset{0}{Z}'. \quad (27.6)$$

В предположении об устойчивости (при каждом  $s$ ) в линейном приближении точки покоя (27.5) существует набор из  $n$  линейно независимых собственных векторов  $f_k(s) = a_k(\tilde{R}(s))$ ,  $k = \overline{1, n}$ , матрицы  $\mathcal{H}_{\text{var}}(s)$

$$\mathcal{H}_{\text{var}}(s) f_k = i \overset{0}{\Omega}_k(\tilde{R}(s)) f_k, \quad \text{Im } \overset{0}{\Omega}_k = 0, \quad (27.7)$$

таких, что

$$\{f_k, f_l\} = 0, \quad \{f_k, f_l^*\} = 2i \delta_{kl}, \quad k, l = \overline{1, n}. \quad (27.8)$$

По терминологии Маслова [32], такой набор векторов задает простейший вариант комплексного роста на нульмерном лагранжевом многообразии. В этом случае решение системы (27.6) с учетом условия (27.1) имеет вид

$$\overset{1}{Z}(s) = \begin{pmatrix} \overset{1}{\vec{p}}(s) \\ \overset{1}{\vec{x}}(s) \end{pmatrix} = \text{Re} \left[ \sum_{k=1}^n \frac{f_k(s)}{\overset{0}{\Omega}_k(\tilde{R}(s))} \{f_k^*(s), \overset{0}{Z}'(s)\} \right]. \quad (27.9)$$

Таким образом, если справедливы формулы (27.5) и (27.9), а функция (27.2) является адиабатическим решением гамильтоновой системы (25.15).

Перейдем теперь к построению адиабатических решений системы в вариациях (25.17), удовлетворяющих условиям (25.18) и (25.19). Разлагая матрицу  $\mathcal{H}_{\text{var}}(t)$  в ряд Тейлора по степеням  $T^{-1}$  в окрестности стационарной точки (27.5), имеем

$$\mathcal{H}_{\text{var}}(t) = \mathcal{H}_{\text{var}}(s) + \frac{1}{T} \langle \partial_z \mathcal{H}_{\text{var}}(s), \overset{1}{Z}(s) \rangle + O(T^{-2}). \quad (27.10)$$

Решения ищем в виде разложения по собственным векторам  $f_l(s), f_l^*(s)$

$$a_k(t) = \sum_{l=1}^n [A_{lk}(s, \theta) f_l(s) + \tilde{A}_{lk}(s, \theta) f_l^*] \quad (27.11)$$

с коэффициентами

$$A_{lk}(s, \theta) = A_{lk}^0(s, \theta) + \frac{1}{T} A_{lk}^1(s, \theta) + O(1/T^2), \quad (27.12)$$

$$\tilde{A}_{lk}(s, \theta) = \tilde{A}_{lk}^0(s, \theta) + \frac{1}{T} \tilde{A}_{lk}^1(s, \theta) + O(T^{-2}).$$

Здесь  $\theta = (T\Phi_1(s), \dots, T\Phi_n(s))$  — набор быстро меняющихся ( $T \rightarrow \infty$ ) функций, которые здесь играют роль «быстрых» переменных адиабатического разложения. Вещественные функции  $\Phi_k(s)$ ,  $k = \overline{1, n}$ , не зависят от  $T$  и подлежат определению. Очевидно, что в этом случае  $\partial_t = \frac{1}{T}\partial_s + \Phi'(s)\partial_\theta$ . Подставив (27.11) и (27.12) в (25.17) и приравняв слагаемые при одинаковых степенях  $1/T$ , получим в нулевом порядке

$$\sum_{j=1}^n \Phi'_j \frac{\partial A_{lk}^0}{\partial \theta_j} = i\Omega_l^0 A_{lk}^0, \quad \sum_{j=1}^n \Phi'_j \frac{\partial \tilde{A}_{lk}^0}{\partial \theta_j} = i\Omega_l^0 \tilde{A}_{lk}^0. \quad (27.13)$$

Система (27.13) служит для определения функций  $A_{lk}^0$  и  $\tilde{A}_{lk}^0$ . Проинтегрировав ее, найдем

$$A_{lk}^0(s, \theta) = \sum_{j=1}^n A_{lkj}^0(s) e^{i\theta_j \Omega_l^0 / \Phi'_j}, \quad \tilde{A}_{lk}^0(s, \theta) = \sum_{j=1}^n \tilde{A}_{lkj}^0(s) e^{-i\theta_j \Omega_l^0 / \Phi'_j}, \quad (27.14)$$

где  $A_{lkj}^0(s)$  и  $\tilde{A}_{lkj}^0(s)$  — константы интегрирования. Дополнительное требование  $2\pi$ -периодичности функций (27.14) по всем быстрым переменным  $\theta_j$ ,  $j = \overline{1, n}$ , позволяет определить функции

$$\Phi_j(s) = \int_0^s \Omega_j^0(\tilde{R}(s)) ds \quad (27.15)$$

и влечет следующее ограничение на выбор постоянных интегрирования:

$$A_{lkj}^0(s) = C_{lk}^0(s) \delta_{lj}, \quad \tilde{A}_{lkj}^0 = \tilde{C}_{lk}^0(s) \delta_{lj}. \quad (27.16)$$

В свою очередь, из условия периодичности (25.18) решений (27.11) и из соотношений (25.19) следует, что

$$C_{lk}^0(s) = \delta_{lk} e^{-i\mathcal{N}_l(s)}, \quad \tilde{C}_{lk}^0(s) = 0. \quad (27.17)$$

В результате нулевое приближение для функций  $a_k(t)$  имеет вид

$$\overset{0}{a}_k(t) = f_k(s) e^{i(\theta_k - \mathcal{N}_k(s))}, \quad \theta_k = T \int_0^s \Omega_k^0(\tilde{R}(s)) ds, \quad (27.18)$$

где вещественные функции  $\mathcal{N}_k(s)$  остались неопределенными в этом приближении.

Далее в первом порядке адиабатического приближения получаем систему уравнений на функции  $A_{lk}^1$ ,  $\tilde{A}_{lk}^1$ :

$$\sum_{j=1}^n \Omega_j^0 \frac{\partial A_{lk}^1}{\partial \theta_j} - i \Omega_l^0 A_{lk}^1 - \frac{i}{2} e^{i(\theta_k - \mathcal{N}_k)} \left( 2\delta_{lk} \mathcal{N}'_k - \left\{ f_l^*, \frac{D}{ds} f_k \right\} \right) = 0, \quad (27.19)$$

$$\sum_{j=1}^n \Omega_j^0 \frac{\partial \tilde{A}_{lk}^1}{\partial \theta_j} + i \Omega_l^0 \tilde{A}_{lk}^1 - \frac{i}{2} e^{i(\theta_k - \mathcal{N}_k)} \left\{ f_l, \frac{D}{ds} f_k \right\} = 0,$$

где

$$\frac{D}{ds} = \frac{d}{ds} - \langle \partial z \mathcal{H}_{\text{var}}(s), \tilde{Z}(s) \rangle. \quad (27.20)$$

Аналогично предыдущему случаю ищем решения уравнений (27.19), дополненные условием  $2\pi$ -периодичности по переменным  $\theta_j$ ,  $j = \overline{1, n}$ , и соотношениями (25.18) и (25.19). В результате несложных выкладок получаем следующий результат:

$$\mathcal{N}_k(s) = \frac{1}{2} \int_0^s ds \left\{ f_k^*, \frac{D}{ds} f_k \right\}, \quad (27.21)$$

$$A_{lk}^1(s, \theta) = e^{i(\theta_k - \mathcal{N}_k(s))} \left[ C_k^1(s) \delta_{lk} + \frac{1 - \delta_{lk}}{2(\Omega_l^0 - \Omega_k^0)} \left\{ f_l^*, \frac{D}{ds} f_k \right\} \right], \quad (27.22)$$

$$\tilde{A}_{lk}^1(s, \theta) = e^{i(\theta_k - \mathcal{N}_k(s))} \frac{1}{2(\Omega_l^0 + \Omega_k^0)} \left\{ f_l, \frac{D}{ds} f_k \right\}. \quad (27.23)$$

Вошедшие в (27.22) функции  $C_k^1(s)$  определяются из последующих приближений и, кроме того, удовлетворяют условию  $C_k^1(s+1) = C_k^1(s)$ . Подчеркнем, что соотношения (27.22) и (27.23) получены в предположении об отсутствии резонансных соотношений между частотами, т.е.  $\sum_{j=1}^n m_j \Omega_j^0(\tilde{R}(s)) \neq 0$ ,  $m_j \in \mathbb{Z}$ .

В результате подстановки (27.22) и (27.23) в (27.11) с учетом (27.14) получим

$$a_k(t) = e^{i(\theta_k - \mathcal{N}_k(s))} \sum_{l=1}^n \left\{ \left[ \left( 1 + \frac{1}{T} C_k^1(s) \right) \delta_{lk} + \frac{1 - \delta_{lk}}{2T(\Omega_l^0 - \Omega_k^0)} \left\{ f_l^*, \frac{D}{ds} f_k \right\} \right] f_l + \frac{1}{2T(\Omega_l^0 + \Omega_k^0)} \left\{ f_l, \frac{D}{ds} f_k \right\} f_l^* \right\} + O(T^{-2}). \quad (27.24)$$

Сравнение выражения (27.24) с условием квазипериодичности (25.18) показывает, что

$$\Omega_k = \int_0^1 \Omega_k^0(\tilde{R}(s)) ds - \frac{1}{2T} \int_0^1 \left\{ f_k^*, \frac{D}{ds} f_k \right\} ds + O(1/T^2). \quad (27.25)$$

Построение адиабатического решения системы (25.15) проводится по той же схеме, что и выше. В результате требуемое (по  $\text{mod } T^{-1}$ ) решение, удовлетворяющее условию  $T$ -периодичности, представляется в виде

$$Z_{(\nu)}^{(1)}(t) = \frac{1}{2} \text{Re} \left[ \sum_{k=1}^n f_k^*(s) \frac{1}{\Omega_k^0(\tilde{R}(s))} \left\{ \mathcal{F}_{(\nu)}(s), f_k(s) \right\} \right] + O(1/T), \quad (27.26)$$

где  $\mathcal{F}_{(\nu)}(s)$  есть нулевое приближение для вектор-функции  $\mathcal{F}_{(\nu)}(t)$  (26.7).

Подставив выражения (27.18), (27.25) и (27.26) в формулу (26.3), получим

$$\gamma_{\varepsilon_\nu} = \beta_\nu(C) + O\left(\frac{1}{T}\right), \quad (27.27)$$

где

$$\begin{aligned} \beta_\nu(C) = & \sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{\hbar} \oint_C \left\langle P_0(R), \frac{\partial Q_0(R)}{\partial R_i} \right\rangle dR_i + \right. \\ & \left. + \sum_{k=1}^n (\nu_k + 1/2) \oint_C \{a_k^*(R), \mathcal{T}_k^{(i)}(R)\} dR_i \right], \end{aligned} \quad (27.28)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_k^{(i)}(R) = & \frac{1}{2} \frac{\partial a_k(R)}{\partial R_i} - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^n \frac{1}{\Omega_k^0(R)} \times \\ & \times \left[ \operatorname{Re} \left( \langle \nabla \mathcal{H}_{\text{var}}(R), a_l(R) \rangle \{a_l^*(R), \frac{\partial X^0(R)}{\partial R_i}\} \right) \right] a_k(R). \end{aligned} \quad (27.29)$$

Здесь  $C$  — замкнутый контур, прочерчиваемый концом вектора  $R(t)$ ,  $t \in [0, T]$ , в пространстве параметров  $(R_1, \dots, R_N)$ .

## 28. Квазиэнергетические спектральные серии и фаза Ааронова–Ананда квантовых систем специального вида

В качестве первого примера, иллюстрирующего общую схему, изложенную выше, рассмотрим одномерный квантовый осциллятор под действием внешней силы, синусоидально зависящей от времени [7, 44]. Гамильтониан системы в этом случае имеет вид

$$\widehat{\mathcal{H}}(t) = \frac{1}{2} \hat{p}^2 + \frac{\omega^2}{2} x^2 - xF \sin \omega_0 t, \quad (28.1)$$

где  $\omega$ ,  $\omega_0$  и  $F$  — константы. Таким образом,  $\widehat{\mathcal{H}}(t+T) = \widehat{\mathcal{H}}(t)$ , где  $T = 2\pi/\omega_0$ . Гамильтониану (28.1) отвечает классическая функция Гамильтона вида

$$\mathcal{H}(t) = \frac{1}{2} p^2 + \frac{\omega^2}{2} x^2 - xF \sin \omega_0 t. \quad (28.2)$$

В этом случае система Гамильтона (25.15) допускает  $T$ -периодическое решение в виде эллипса

$$p = \frac{F\omega_0}{\omega^2 - \omega_0^2} \cos \omega_0 t, \quad x = \frac{F}{\omega^2 - \omega_0^2} \sin \omega_0 t, \quad \omega \neq \omega_0. \quad (28.3)$$

В силу того, что матрица  $\mathcal{H}_{\text{var}} = \text{const}$ , задача построения решений Флоке (25.18), нормированных условием (25.19), сводится к определению ее собственных значений. В итоге находим

$$a(t) = e^{i\omega t} f_0, \quad f_0 = \begin{pmatrix} \sqrt{\omega} \\ -i/\sqrt{\omega} \end{pmatrix}. \quad (28.4)$$

Но тогда, согласно (26.4), имеем

$$\tilde{a}(t) = f_0 = \text{const}. \quad (28.5)$$

Из (26.14) следует, что фаза  $\gamma_{\varepsilon}$  в этом случае не зависит от  $\nu$  и равна

$$\hbar\gamma_{\varepsilon} = \int_0^T dt p(t)\dot{x}(t) = \frac{F^2\omega_0\pi}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2}. \quad (28.6)$$

Таким образом, она имеет простой квазиклассический смысл: величина  $\hbar\gamma_{\varepsilon}$  есть площадь, заметаемая радиус-вектором  $z(t) = (p(t), x(t))$  при движении точки по фазовой плоскости.

В качестве второго примера рассмотрим движение релятивистской бесспиновой частицы, описываемое уравнением Клейна–Гордона

$$[\hat{\mathcal{P}}_0^2 - c^2\hat{\mathcal{P}}^2 - m_0^2c^4]\Psi = 0, \quad \hat{\mathcal{P}}_0 = i\hbar\partial_t - e\mathcal{A}_0, \quad \hat{\mathcal{P}} = -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{\mathcal{A}}, \quad (28.7)$$

в поле Редмонда

$$\mathcal{A}_0 = 0, \quad \vec{\mathcal{A}} = \left( -\frac{cE_0}{\omega} \sin \omega\xi + \frac{H}{2}y, \frac{cE_0g}{\omega} \cos \omega\xi - \frac{H}{2}x, 0 \right), \quad (28.8)$$

где  $\xi = t - z/c$ ,  $g$  определяет левую ( $g = 1$ ) и правую ( $g = -1$ ) круговую поляризацию,  $E_0$  — амплитуда напряженности электрического поля. Задача нахождения квазиэнергетических состояний и отвечающей им фазы Ааронова–Ананда в поле (28.8) для уравнения Клейна–Гордона (28.7) в специальных системах координат может быть сведена к задаче (25.3), (25.8) для уравнения Шрёдингера, рассмотренной ранее.

Перейдем в уравнении (28.7) к так называемым координатам нулевой плоскости [43]:

$$u_0 = t - z/c, \quad u_1 = x, \quad u_2 = y, \quad u_3 = t + z/c. \quad (28.9)$$

Уравнения (28.7), (28.8) имеют в координатах нулевой плоскости (28.9) следующий вид:

$$\{4\hat{p}_0\hat{p}_3 - c^2\hat{\mathcal{P}}_1^2 - c^2\hat{\mathcal{P}}_2^2 - m_0^2c^4\}\Psi = 0, \quad (28.10)$$

$$\hat{\mathcal{P}}_k = \hat{p}_k - \frac{e}{c}\mathcal{A}_k, \quad \hat{p}_k = -i\hbar\partial_{u_k}, \quad k = \overline{0, 3},$$

а скалярное произведение

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int d^3u [\Psi_1^* \hat{p}_3 \Psi_2 + (\hat{p}_3 \Psi_1)^* \Psi_2]. \quad (28.11)$$

Решение уравнения (28.10) может быть найдено в виде

$$\Psi(\vec{u}, u_0, \hbar) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\lambda u_3\right) \tilde{\Psi}(\vec{u}_{\perp}, u_0, \hbar), \quad \vec{u}_{\perp} = (u_1, u_2), \quad (28.12)$$

где функция  $\tilde{\Psi}$  удовлетворяет уравнению Шрёдингера

$$\{-i\hbar\partial_{u_0} + \hat{\mathcal{H}}(u_0)\}\tilde{\Psi} = 0, \quad (28.13)$$

а

$$\hat{\mathcal{H}}(u_0) = \frac{c^2}{4\lambda} [\hat{\mathcal{P}}_1^2 + \hat{\mathcal{P}}_2^2 + m_0^2c^2]. \quad (28.14)$$

Скалярное произведение для функций  $\tilde{\Psi}$  имеет следующий вид:

$$\langle \tilde{\Psi}_1 | \tilde{\Psi}_2 \rangle = 2\lambda \int d^2u \tilde{\Psi}_1^* \tilde{\Psi}_2. \quad (28.15)$$

Следовательно, функции  $\tilde{\Psi}$  удовлетворяют уравнению Шрёдингера с периодическим гамильтонианом (28.14), где  $u_0$  играет роль времени.

Система Гамильтона, соответствующая уравнению Шрёдингера (28.13), имеет вид

$$\begin{aligned} \dot{\vec{u}}_{\perp} &= \frac{c^2}{2\lambda} \vec{\mathcal{P}}_{\perp}, & \dot{\vec{p}}_{\perp} &= -\frac{i\omega_0}{2} \sigma_2 \vec{\mathcal{P}}_{\perp}; \\ \vec{\mathcal{P}}_{\perp} &= \vec{p}_{\perp} - i \frac{eH}{2c} \sigma_2 \vec{u}_{\perp} - \frac{e}{c} \vec{\mathcal{A}}_{\perp}, \\ \vec{\mathcal{A}}_{\perp} &= \frac{cE_0g}{\omega} \exp(-ig\sigma_2\omega u_0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \omega_0 &= \frac{ecH}{2\lambda}, & \vec{u}_{\perp}(t+T) &= \vec{u}_{\perp}(t), & \vec{p}_{\perp}(t+T) &= \vec{p}_{\perp}(t), \\ \vec{p}_{\perp} &= \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix}, & \vec{u}_{\perp} &= \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}, & \sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (28.16)$$

Исключив  $\vec{p}_{\perp}$  из системы уравнений (28.16), можно записать

$$\ddot{\vec{u}}_{\perp} + i\omega_0\sigma_2\dot{\vec{u}}_{\perp} = -\frac{ec}{2\lambda} \dot{\vec{\mathcal{A}}}_{\perp}.$$

После интегрирования этого уравнения получим

$$\dot{\vec{u}}_{\perp} + i\omega_0\sigma_2\vec{u}_{\perp} = -\frac{ec}{2\lambda} \vec{\mathcal{A}}_{\perp} + \vec{\alpha}_{\perp}, \quad \vec{\alpha}_{\perp} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \text{const.} \quad (28.17)$$

В отсутствие резонансных соотношений, т.е. при  $\omega_0 \neq \omega$

$$\vec{u}_{\perp} = e^{-i\sigma_2\omega_0 u_0} \vec{v}_{\perp} - \frac{i}{\omega_0} \sigma_2 \vec{\alpha}_{\perp} - \frac{ec}{2\lambda} e^{-i\sigma_2\omega_0 u_0} \int_0^{u_0} e^{i\sigma_2\omega_0 \tau} \vec{\mathcal{A}}_{\perp}(\tau) d\tau, \quad (28.18)$$

где  $\vec{v}_{\perp} = \text{const}$ , периодическое решение получим в виде

$$\vec{u}_{\perp} = -\frac{i}{\omega_0} \sigma_2 \vec{\alpha}_{\perp} + \frac{i}{\omega_0 - g\omega} \frac{ec}{2\lambda} \sigma_2 \vec{\mathcal{A}}_{\perp}. \quad (28.19)$$

Из (28.16), (28.19) найдем

$$\vec{p}_{\perp} = \frac{2\lambda}{c^2} \dot{\vec{u}}_{\perp} + \frac{e}{c} \vec{\mathcal{A}}_{\perp} - \frac{eH}{2c} i\sigma_2 \vec{u}_{\perp} = \frac{eH}{2c\omega} \vec{\alpha}_{\perp} + \frac{e}{2c(\omega_0 - g\omega)} \vec{\mathcal{A}}_{\perp}. \quad (28.20)$$

Система в вариациях, отвечающая гамильтониану (28.14), может быть записана в виде

$$\dot{\vec{W}} = i\frac{\omega_0}{2} \sigma_2 \vec{W} + \frac{\lambda\omega_0^2}{2c^2} \vec{Z}, \quad \dot{\vec{Z}} = \frac{c^2}{2\lambda} \vec{W} - i\frac{\omega_0}{2} \sigma_2 \vec{Z}. \quad (28.21)$$

Следовательно,

$$\ddot{\vec{Z}} + i\omega_0\sigma_2\dot{\vec{Z}} = 0. \quad (28.22)$$

Определим собственные векторы матрицы  $\sigma_2$  как  $\vec{f}_{\zeta}$ :

$$\sigma_2 \vec{f}_{\zeta} = \zeta \vec{f}_{\zeta}, \quad \langle \vec{f}_{\zeta}, \vec{f}_{\zeta'} \rangle = \delta_{\zeta\zeta'}, \quad \zeta, \zeta' = \pm 1, \quad \vec{f}_{\zeta} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i\zeta \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (28.23)$$

Так,

$$a_k(u_0) = N_k \begin{pmatrix} \vec{W}^k \\ \vec{Z}^k \end{pmatrix}, \quad k = 1, 2, \quad (28.24)$$

где

$$\begin{aligned}\vec{Z}^1 &= e^{-i\zeta\omega_0 u_0} f_\zeta, & \vec{W}^1 &= -i\zeta \frac{\lambda\omega_0}{c^2} e^{-i\zeta\omega_0 u_0} \vec{f}_\zeta, \\ \vec{Z}^2 &= \vec{f}_{-\zeta}, & \vec{W}^2 &= -i\zeta \frac{\lambda\omega_0}{c^2} \vec{f}_{-\zeta}.\end{aligned}\quad (28.25)$$

Из условия нормировки  $\{a_k, a_l^*\} = 2i\delta_{kl}$  найдем константы  $N_k$  и  $\zeta$  и окончательно получим

$$N_1^2 = N_2^2 = \frac{c^2}{\lambda\omega_0^2}, \quad \zeta = -1, \quad (28.26)$$

и для спектра квазиэнергий найдем

$$\mathcal{E}_\lambda = \frac{1}{T} \int_0^T (\tilde{\mathcal{H}}(t) - \langle \vec{p}_\perp, \dot{\vec{u}}_\perp \rangle) dt + \hbar\omega_0(\nu_1 + \frac{1}{2}). \quad (28.27)$$

Вычислим теперь интегралы

$$\begin{aligned}\int_0^T \langle \vec{p}_\perp, \dot{\vec{u}}_\perp \rangle dt &= \frac{ge^2 c^2 \omega_0 E_0^2}{4\omega\lambda(\omega_0 - g\omega)^2} T, \\ \int_0^T \tilde{\mathcal{H}}(t) dt &= \left( \frac{e^2 c^2 E_0^2}{4\lambda(\omega_0 - g\omega)^2} + \frac{m_0^2 c^4}{4\lambda} \right) T.\end{aligned}$$

В результате для спектра квазиэнергий и для фазы Ааронова–Ананда получим

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_{\lambda,\nu} &= \frac{ge^2 c^2 E_0^2}{4\omega\lambda(\omega_0 - g\omega)} + \frac{m_0^2 c^4}{4\lambda} + \hbar\omega_0(\nu_1 + 1/2), \\ \hbar\gamma_\nu &= \int_0^T \langle \vec{p}_\perp, \dot{\vec{u}}_\perp \rangle dt = \frac{ge^2 c^2 \omega_0 E_0^2 T}{4\omega\lambda(\omega_0 - g\omega)^2}.\end{aligned}\quad (28.28)$$

Следовательно, в поле (28.8) квазиклассический предел фазы Ааронова–Ананда есть площадь, замечаемая векторами  $\vec{p}_\perp, \vec{u}_\perp$  на симплектической поверхности.

## Квазиклассические спектральные серии оператора Шрёдингера

### 29. Пространство функций, квазиклассически сосредоточенных на замкнутых траекториях

В разделе «Траекторно сосредоточенные функции» мы ввели класс функций  $\mathcal{P}_\hbar^t(Z(t, \hbar), S(t, \hbar))$ , который по правилу (8.5) сопоставляется каждой фазовой траектории  $z = Z(t, \hbar)$ ,  $z = (\vec{p}, \vec{x}) \in \mathbb{R}^{2n}$ , и скалярной функции  $S(t, \hbar)$ . Класс  $\mathcal{P}_\hbar^t$  обладает рядом замечательных свойств, позволивших построить квазиклассические асимптотики уравнений Шрёдингера, Клейна–Гордона, Дирака и Хартри. Траекторно-сосредоточенные функции обладают характерным свойством: в любой момент времени  $t \in \mathbb{R}^1$  в пределе  $\hbar \rightarrow 0$  они сосредоточены в окрестности точки, лежащей на фазовой траектории  $z = Z(t, 0)$ . В настоящем разделе мы обобщим понятие траекторной сосредоточенности функций в окрестности точки на сосредоточенность в окрестности фазовой кривой.

Пусть при каждом фиксированном  $t$

$$\Lambda^1 = \{z = Z(t, s)\}, \quad Z(t, s) = (\vec{P}(t, s), \vec{X}(t, s)) \quad (29.1)$$

– гладкая кривая в фазовом пространстве. Здесь  $s \in \mathbb{R}^1$  – параметр на кривой. Изменение параметра  $t$  описывает эволюцию кривой в фазовом пространстве. В дальнейшем нас, как правило, будут интересовать  $T$ -периодические кривые, инвариантные относительно изменения параметра  $t$ . Инвариантность означает, что

$$Z(t, s) = Z(\omega t + s_0) = Z(s), \quad s = \omega t + s_0, \quad (29.2)$$

где  $Z(s)$  –  $2\pi$ -периодическая функция переменной  $s \in \mathbb{R}^1$ :  $Z(s + 2\pi) = Z(s)$ , и  $\omega = 2\pi/T$ . Предположим, что

$$\text{rang} \left( \frac{\partial X_1(s)}{\partial s}, \dots, \frac{\partial X_n(s)}{\partial s} \right) = 1. \quad (29.3)$$

Фазовой кривой  $z = Z(s)$  сопоставим семейство гиперповерхностей  $\tau(\vec{x}) = t$ , определяемых уравнением

$$\left\langle \frac{\partial \vec{X}(t)}{\partial t} \Big|_{t=\tau(\vec{x})}, \Delta \vec{x} \right\rangle = 0, \quad \Delta \vec{x} = \vec{x} - \vec{X}(\tau(\vec{x})). \quad (29.4)$$

◇ Из определения (29.4) следует, что в конфигурационном пространстве кривая  $\vec{x} = \vec{X}(t, s)$  ортогональна гиперповерхности  $\tau(\vec{x}) = t$ .

Класс функций, квазиклассически сосредоточенных на кривой  $z = Z(s)$ , определим соотношением

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_\hbar^\tau &= \mathcal{J}_\hbar^{\tau(\vec{x})} = \mathcal{J}_\hbar^{\tau(\vec{x})}(Z(\tau(\vec{x})), S(\tau(\vec{x}))) = \\ &= \left\{ \Phi : \Phi(\vec{x}, \hbar) = \mathcal{X}(\vec{x}, t, \hbar) \Big|_{t=\tau(\vec{x})}, \mathcal{X}(\vec{x}, t, \hbar) \in \mathcal{P}_\hbar^t \right\}. \end{aligned} \quad (29.5)$$

На функциях класса  $\mathcal{J}_\hbar^\tau$  справедливо представление оператора импульса  $\hat{p} = -i\hbar \nabla$  в виде

$$\hat{p} = -i\hbar \left( \nabla \Big|_{t=\text{const}} + \nabla \tau(\vec{x}) \frac{\partial}{\partial t} \right). \quad (29.6)$$

Обозначим через

$$\hat{\pi} = -i\hbar \nabla \Big|_{t=\text{const}}, \quad \Delta \hat{p} = \hat{\pi} - \vec{P}(\tau(\vec{x})). \quad (29.7)$$

Тогда справедлива теорема



**Теорема 29.1.** На функциях класса  $\mathcal{J}_\hbar^\tau(Z(\tau(\vec{x}), \hbar), S(\tau(\vec{x}), \hbar))$  справедливы следующие асимптотические оценки:

$$\{\Delta\hat{z}\}^\alpha = \widehat{O}(\hbar^{|\alpha|/2}), \quad \Delta\hat{z} = (\Delta\vec{p}, \Delta\vec{x}), \quad (29.8)$$

$$\Delta_\alpha(\hbar) = \frac{\langle \Phi | \{\Delta\hat{z}\}^\alpha | \Phi \rangle}{\|\Phi\|^2} = O(\hbar^{|\alpha|/2}), \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (29.9)$$

Здесь через  $\{\Delta\hat{z}\}^\alpha$  обозначен оператор с вейлевским символом  $(\Delta z)^\alpha$ ,  $\alpha \in \mathbb{Z}_+^{2n}$ ,

$$\begin{aligned} \Delta z &= z - Z(\tau(\vec{x}), \hbar) = (\Delta\vec{p}, \Delta\vec{x}), \\ \Delta\vec{p} &= \vec{p} - \vec{P}(\tau(\vec{x}), \hbar), \quad \Delta\vec{x} = \vec{x} - \vec{X}(\tau(\vec{x}), \hbar). \end{aligned}$$

**Доказательство.** 1. Символ оператора  $\{\Delta\hat{z}\}^\alpha$  можно записать в виде

$$(\Delta z)^\alpha = (\Delta\vec{p})^{\alpha_p} (\Delta\vec{x})^{\alpha_x}, \quad (\alpha_p, \alpha_x) = \alpha,$$

и, следовательно, согласно определению упорядоченных по Вейлю псевдодифференциальных операторов, для среднего значения  $\sigma_\alpha(\hbar)$  оператора  $\{\Delta\hat{z}\}^\alpha$  имеем

$$\sigma_\alpha(\hbar) = \langle \Phi | \{\Delta\hat{z}\}^\alpha | \Phi \rangle.$$

С учетом явного вида функций

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{x}, \hbar) &= \chi(\vec{x}, \tau(\vec{x}), \hbar) = \\ &= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (S(t, \hbar) + \langle \vec{P}(t, \hbar), \Delta\vec{x} \rangle) \right\} \varphi \left( \frac{\Delta\vec{x}}{\sqrt{\hbar}}, t, \hbar \right) \Big|_{t=\tau(\vec{x})}, \end{aligned} \quad (29.10)$$

принадлежащих классу  $\mathcal{J}_\hbar^t$ , запишем

$$\begin{aligned} \sigma_\alpha(\hbar) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^{3n}} d\vec{x} d\vec{y} d\vec{p} \varphi^* \left( \frac{\Delta\vec{x}}{\sqrt{\hbar}}, \tau(\vec{x}), \hbar \right) \vec{p}^{\alpha_p} \times \\ &\times \left[ \frac{\Delta\vec{x} + \Delta\vec{y}}{2} \right]^{\alpha_x} \exp \left( \frac{i}{\hbar} \langle (\vec{x} - \vec{y}), \vec{p} \rangle \right) \varphi \left( \frac{\Delta\vec{y}}{\sqrt{\hbar}}, \tau(\vec{y}), \hbar \right). \end{aligned} \quad (29.11)$$

Здесь обозначено

$$\Delta\vec{y} = \vec{y} - \vec{X}(\tau(\vec{y}), \hbar).$$

2. Определим  $n \times n$ -матрицу  $A(t)$  следующим образом:

$$A(t) = \begin{pmatrix} \dot{\vec{X}}^\top(t) \\ \vec{A}_2^\top(t) \\ \vdots \\ \vec{A}_n^\top(t) \end{pmatrix}, \quad (29.12)$$

где

$$\langle \dot{\vec{X}}(t), \vec{A}_k(t) \rangle = 0, \quad \langle \vec{A}_k(t), \vec{A}_j(t) \rangle = \delta_{kj}, \quad k, j = \overline{2, n}. \quad (29.13)$$

В силу условий (29.13) матрица  $A(s)$  ортогональна, причем

$$A^{-1}(t) = \left( \frac{1}{[\dot{\vec{X}}(t)]^2} \dot{\vec{X}}(t), \vec{A}_2(t), \vec{A}_3(t), \dots, \vec{A}_n(t) \right). \quad (29.14)$$

Определим переменную  $\vec{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) \in \mathbb{R}^n$  соотношением

$$\vec{\xi} = A(\tau(\vec{x}))\Delta\vec{x}, \quad \Delta\vec{x} = A^{-1}(\tau(\vec{x}))\vec{\xi}. \quad (29.15)$$

В силу определения гиперплоскости  $t = \tau(\vec{x})$  (29.4) переменная  $\xi_1$  тождественно равна нулю ( $\xi_1 \equiv 0$ ).

Тогда

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \Big|_{t=\text{const}} = \sum_{j=2}^n A_j^k(\tau(\vec{x})) \frac{\partial}{\partial \xi_j}. \quad (29.16)$$

Следовательно,

$$p^k = \sum_{j=2}^n A_j^k(\tau) p_{\xi_j}. \quad (29.17)$$

Сделаем в интеграле (29.11) замену переменных

$$\begin{aligned} \vec{x} &\rightarrow (t_1, \sqrt{\hbar}\xi_2, \dots, \sqrt{\hbar}\xi_n), \\ \vec{y} &\rightarrow (t_2, \sqrt{\hbar}\zeta_2, \dots, \sqrt{\hbar}\zeta_n), \\ \vec{p} &\rightarrow (t_3, \sqrt{\hbar}\omega_2, \dots, \sqrt{\hbar}\omega_n), \end{aligned}$$

где  $\vec{\zeta}$ ,  $\vec{\omega}$  определяются соотношениями (29.4), (29.15), (29.17). Тогда

$$\begin{aligned} \sigma_\alpha(\hbar) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \hbar^{3(n-1)/2} \hbar^{|\alpha|/2} 2^{-|\alpha_p|} \int_0^T dt_1 \int_0^T dt_2 \int_0^T dt_3 \times \\ &\times \int_{\mathbb{R}^{3(n-1)}} d\vec{\xi}' d\vec{\zeta}' d\vec{\omega}' \varphi^*(\vec{\xi}', t_1, \hbar) \exp\{i\langle(\vec{\xi}' - \vec{\zeta}'), \vec{\omega}'\rangle\} \times \\ &\times \{[A^{-1}(t_3)]^\top \vec{\omega}'\}^{\alpha_p} [A^{-1}(t_1)\vec{\xi}' + A^{-1}(t_2)\vec{\zeta}']^{\alpha_x} \times \\ &\times \det A(t_2) \det A(t_1) \det A(t_3) = \hbar^{(n+|\alpha|-1)/2} M_\alpha(\hbar). \end{aligned}$$

Здесь

$$d\vec{\xi}' = d\xi_2 \dots d\xi_n, \quad d\vec{\zeta}' = d\zeta_2 \dots d\zeta_n, \quad d\vec{\omega}' = d\omega_2 \dots d\omega_n$$

и мы воспользовались соотношением

$$J(t) = \left| \frac{\partial \vec{x}}{\partial t}, \frac{\partial \vec{x}}{\partial \xi_2}, \dots, \frac{\partial \vec{x}}{\partial \xi_n} \right| = \left| \dot{\vec{X}}(t), \vec{A}_2(t), \dots, \vec{A}_n(t) \right| = \det A(t). \quad (29.18)$$

Аналогично

$$\|\Phi\|^2 = \hbar^{(n-1)/2} \int_0^T dt \det A(t) \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \varphi^*(\vec{\xi}, t, \hbar) \varphi(\vec{\xi}, t, \hbar) d\vec{\xi} = \hbar^{(n-1)/2} M_0(\hbar).$$

Учтем, что  $\varphi(\vec{\xi}, t, \hbar)$  зависит от  $\sqrt{\hbar}$  регулярно и  $M_0(\hbar) > 0$ . Следовательно,

$$\Delta_\alpha(\hbar) = \frac{\sigma_\alpha(\hbar)}{\|\Phi\|^2} = \hbar^{|\alpha|/2} \frac{M_\alpha(\hbar)}{M_0(\hbar)} = O(\hbar^{|\alpha|/2}).$$

Таким образом, соотношение (29.9) доказано.

3. Соотношение (29.8) доказывается аналогично.

**Следствие 29.1.1.** На классе  $\mathcal{J}_\hbar^\tau$  справедливы асимптотические оценки

$$\Delta x_k = \widehat{O}(\sqrt{\hbar}), \quad \Delta \hat{p}_k = \widehat{O}(\sqrt{\hbar}), \quad k = \overline{1, n}, \quad (29.19)$$

и

$$\left\{ -i\hbar \partial_t - \dot{S}(t) + \langle \vec{P}(t), \dot{\vec{X}}(t) \rangle + \langle \dot{\vec{Z}}(t), J \Delta \hat{z} \rangle \right\} \Big|_{t=\tau(\vec{x})} = \widehat{O}(\hbar). \quad (29.20)$$

### 30. Асимптотические решения уравнения Шрёдингера

Решение стационарного уравнения Шрёдингера

$$(\widehat{\mathcal{H}} - E)\Psi = 0, \quad \widehat{\mathcal{H}} = \mathcal{H}(\hat{z}), \quad \hat{z} = (\hat{p}, \hat{x}), \quad (30.1)$$

где  $\widehat{\mathcal{H}}$  – упорядоченный по Вейлю псевдодифференциальный оператор, будем искать в классе функций  $\mathcal{J}_h^{\tau(\vec{x})}$ .

Тогда с учетом оценок (29.19) и (29.20) уравнение (30.1) на функциях этого класса можно представить в виде

$$\begin{aligned} & \left\{ \mathcal{H}(t) + \langle \mathcal{H}_z(t), \Delta \hat{z} \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta \hat{z}, \mathcal{H}_{zz}(t) \Delta \hat{z} \rangle + \right. \\ & + \frac{1}{2} [\langle \mathcal{H}_{\hat{p}}(t), \nabla \tau \rangle, \{-i\hbar \partial_t - \dot{S}(t) + \langle \vec{P}(t), \dot{X}(t) \rangle + \hat{a}_0(t)\}]_+ + \\ & + \langle \mathcal{H}_{\hat{p}}(t), \nabla \tau \rangle \{ \dot{S}(t) - \langle \vec{P}(t), \dot{X}(t) \rangle - \hat{a}_0(t) \} + \\ & + \frac{1}{2} \langle \nabla \tau \{ \hat{a}_0(t) - \dot{S}(t) + \langle \vec{P}(t), \dot{X}(t) \rangle \}, \mathcal{H}_{pp}(t) \nabla \tau \{ \hat{a}_0(t) - \dot{S}(t) + \langle \vec{P}(t), \dot{X}(t) \rangle \} \rangle + \\ & + \frac{1}{2} [ \langle \Delta \vec{x}, \mathcal{H}_{xp}(t) \nabla \tau \rangle + \langle \Delta \hat{p}, \mathcal{H}_{pp}(t) \nabla \tau \rangle ] \times \\ & \times \{ -\dot{S}(t) + \langle \vec{P}(t), \dot{X}(t) \rangle + \hat{a}_0(t) \} ]_+ - E \Big|_{t=\tau(\vec{x})} \Psi = O(\hbar^{3/2}). \end{aligned} \quad (30.2)$$

Здесь  $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}|_{\Delta^1}$  и обозначено

$$\hat{a}_0(t) = \langle \dot{Z}(t), J \Delta \hat{z} \rangle = \langle \dot{X}(t), \Delta \hat{p} \rangle - \langle \dot{P}(t), \Delta \hat{x} \rangle. \quad (30.3)$$

Мы предположили также, что, по меньшей мере,

$$\dot{S}(t) - \langle \vec{P}(t), \dot{X}(t) \rangle = O(\sqrt{\hbar}), \quad E - \mathcal{H}(t) = O(\hbar). \quad (30.4)$$

Продифференцируем соотношение (29.4) по  $\vec{x}$ , получим

$$\left\{ \langle \ddot{X}(t), \Delta \vec{x} \rangle \nabla \tau(\vec{x}) + \dot{X}(t) - \dot{X}^2(t) \nabla \tau(\vec{x}) \right\} \Big|_{t=\tau(\vec{x})} = 0.$$

Следовательно,

$$\nabla \tau(\vec{x}) = \frac{1}{\dot{X}^2(t) - \langle \dot{X}(t), \Delta \vec{x} \rangle} \dot{X}(t) \Big|_{t=\tau(\vec{x})}. \quad (30.5)$$

Из (30.5) с учетом оценок (29.19) найдем

$$\begin{aligned} \nabla \tau(\vec{x}) = & \left\{ \frac{1}{\dot{X}^2(t)} \dot{X}(t) \left[ 1 + \frac{1}{\dot{X}^2(t)} \langle \ddot{X}(t), \Delta \vec{x} \rangle + \right. \right. \\ & \left. \left. + \left( \frac{1}{\dot{X}^2(t)} \langle \ddot{X}(t), \Delta \vec{x} \rangle \right)^2 \right] \right\} \Big|_{t=\tau(\vec{x})} + O(\hbar^{3/2}). \end{aligned} \quad (30.6)$$

Следовательно,

$$\frac{1}{2} [\nabla \tau(\vec{x}), \hat{a}_0(t)]_+ = \nabla \tau(\vec{x}) \hat{a}_0(t) + \frac{-i\hbar}{\dot{X}^2(t)} \ddot{X}(t) + O(\hbar^{3/2}), \quad (30.7)$$

и выражение (30.2) можно записать в виде

$$\begin{aligned}
& \left\{ \mathcal{H}(t) - E + \langle \mathcal{H}_z(t), \Delta \hat{z} \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta \hat{z}, \mathcal{H}_{zz}(t) \Delta \hat{z} \rangle + \right. \\
& + \frac{1}{\dot{X}^2(t)} \langle \mathcal{H}_{\vec{p}}(t), \dot{X}(t) \rangle \{ -i\hbar \partial_t - \dot{S}(t) + \langle \vec{P}(t), \dot{X}(t) \rangle + \hat{a}_0(t) \} - \\
& - i\hbar \frac{1}{2\dot{X}^2(t)} \langle \mathcal{H}_{\vec{p}}(t), \ddot{X}(t) \rangle + \frac{1}{\dot{X}^2(t)} \langle \mathcal{H}_{\vec{p}}(t), \dot{X}(t) \rangle \times \\
& \times \left[ 1 + \frac{1}{\dot{X}^2(t)} \langle \ddot{X}(t), \Delta \vec{x} \rangle \right] [\dot{S}(t) - \langle \vec{P}(t), \dot{X}(t) \rangle - \hat{a}_0(t)] + \\
& + \left[ \frac{1}{\dot{X}^2(t)} \right]^2 \langle \dot{X}(t), \mathcal{H}_{pp}(t) \dot{X}(t) \rangle [\dot{S}(t) - \langle \vec{P}(t), \dot{X}(t) \rangle - \hat{a}_0(t)]^2 + \\
& + \frac{1}{\dot{X}^2(t)} \left[ \langle \Delta \vec{x}, \mathcal{H}_{xp}(t) \dot{X}(t) \rangle + \langle \Delta \hat{p}, \mathcal{H}_{pp}(t) \dot{X}(t) \rangle \right] \times \\
& \times \{ -\dot{S}(t) + \langle \vec{P}(t), \dot{X}(t) \rangle + \hat{a}_0(t) \} + \frac{i\hbar}{2\dot{X}^2(t)} \left[ \langle \dot{X}(t), \mathcal{H}_{xp}(t) \dot{X}(t) \rangle + \right. \\
& \left. + \langle \dot{P}(t), \mathcal{H}_{pp}(t) \dot{X}(t) \rangle \right] \Bigg|_{t=\tau(\vec{x})} \Psi = O(\hbar^{3/2}). \tag{30.8}
\end{aligned}$$

Пусть теперь кривая  $z = Z(t)$  есть фазовая траектория системы Гамильтона

$$\dot{z} = J\mathcal{H}_z(z),$$

и положим, что

$$S(t) = \int_0^t \langle \vec{P}(t'), \dot{X}(t') \rangle dt' + \hbar S^{(1)}(t).$$

Функция  $\mathcal{H}(z)$  является интегралом системы Гамильтона, т.е.  $\mathcal{H}|_{\Lambda^1} = \text{const}$ . Обозначим

$$S^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar} [E - E^{(0)}]t, \quad E^{(0)} = \mathcal{H}(t).$$

Тогда из (30.8) получим

$$\begin{aligned}
& \left\{ -i\hbar \partial_t - \dot{S}(t) + \langle \vec{P}(t), \dot{X}(t) \rangle - [E - \mathcal{H}(t)] + \frac{1}{2} \langle \Delta \hat{z}, \mathcal{H}_{zz}(t) \Delta \hat{z} \rangle + \hat{a}_0(t) + \right. \\
& + \frac{-i\hbar}{2} \frac{1}{\dot{X}^2(t)} \langle \ddot{X}(t), \dot{X}(t) \rangle + \dot{S}(t) - \langle \vec{P}(t), \dot{X}(t) \rangle + \\
& + \left[ 1 + \frac{1}{\dot{X}^2(t)} \langle \ddot{X}(t), \Delta \vec{x} \rangle \right] \hat{a}_0(t) + \frac{1}{\dot{X}^2(t)} \langle \dot{X}(t), \mathcal{H}_{pp}(t) \dot{X}(t) \rangle \hat{a}_0^2(t) + \\
& + \frac{1}{\dot{X}^2(t)} \left[ \langle \Delta \vec{x}, \mathcal{H}_{xp}(t) \dot{X}(t) \rangle + \langle \Delta \hat{p}, \mathcal{H}_{pp}(t) \dot{X}(t) \rangle \right] \hat{a}_0(t) + \\
& \left. + \frac{i\hbar}{2\dot{X}^2(t)} \left[ \langle \dot{X}(t), \mathcal{H}_{xp}(t) \dot{X}(t) \rangle + \langle \dot{P}(t), \mathcal{H}_{pp}(t) \dot{X}(t) \rangle \right] \right\} \Bigg|_{t=\tau(\vec{x})} \Psi = O(\hbar^{3/2}).
\end{aligned}$$

Следовательно,

$$\left\{ \left[ -i\hbar \partial_t - \dot{S}(t) + \langle \vec{P}(t), \dot{X}(t) \rangle + \hat{a}_0(t) + \frac{1}{2} \langle \Delta \hat{z}, \mathcal{H}_{zz}(t) \Delta \hat{z} \rangle \right] + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \left[ -1 - \frac{1}{\dot{\vec{X}}^2(t)} \langle \ddot{\vec{X}}(t), \Delta \vec{x} \rangle + \frac{1}{\dot{\vec{X}}^2(t)} \langle \dot{\vec{X}}(t), \mathcal{H}_{pp}(t) \dot{\vec{X}}(t) \rangle \hat{a}_0(t) + \right. \\
& \left. + \frac{1}{\dot{\vec{X}}^2(t)} \left( \langle \Delta \vec{x}, \mathcal{H}_{xp}(t) \dot{\vec{X}}(t) \rangle + \langle \Delta \hat{p}, \mathcal{H}_{pp}(t) \dot{\vec{X}}(t) \rangle \right) \hat{a}_0(t) \right] \Big|_{t=\tau(\vec{x})} \Psi = O(\hbar^{3/2}). \quad (30.9)
\end{aligned}$$

Поскольку  $\Psi \in \mathcal{J}_\hbar^{\tau(\vec{x})}$ , то

$$\Psi(\vec{x}, \hbar) = \mathcal{X}(\vec{x}, t, \hbar) \Big|_{t=\tau(\vec{x})}, \quad \mathcal{X} \in \mathcal{P}_\hbar^t. \quad (30.10)$$

Очевидно, что уравнение (30.9) справедливо, если

$$\left[ -i\hbar \partial_t + \widehat{\mathcal{H}}_0(t) \right] \mathcal{X} = O(\hbar^{3/2}); \quad (30.11)$$

$$\hat{a}_0(t) \mathcal{X} = O(\hbar^{3/2}), \quad (30.12)$$

где обозначено

$$\widehat{\mathcal{H}}_0(t) = -\dot{S}(t) + \langle \vec{P}(t), \dot{\vec{X}}(t) \rangle + \langle \Delta \hat{z}, \mathcal{J}\mathcal{H}_z(t) \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta \hat{z}, \mathcal{H}_{zz}(t) \Delta \hat{z} \rangle. \quad (30.13)$$

Таким образом, доказано

**Утверждение 30.1.** Функция  $\Psi$  (30.10) удовлетворяет уравнению (30.1) с точностью до  $O(\hbar^{3/2})$ , если функция  $\mathcal{X}(\vec{x}, t, \hbar)$  удовлетворяет уравнению (30.11) и условию (30.12).

### 31. Семейства замкнутых фазовых кривых с комплексным ростком

Пусть  $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{q})$  – главный символ гамильтониана (30.1), сопоставим ему однопараметрическое по  $E^{(0)}$  семейство функций Гамильтона

$$\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{q}, E^{(0)}) = \mathcal{H}(\vec{p}, \vec{q}) - E^{(0)}, \quad E' \leq E^{(0)} \leq E''. \quad (31.1)$$

Будем предполагать, что гамильтонова система

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \dot{\vec{p}} = -\mathcal{H}_{\vec{q}}(\vec{p}, \vec{q}, E^{(0)}), \quad \frac{d\vec{q}}{dt} = \dot{\vec{q}} = \mathcal{H}_{\vec{p}}(\vec{p}, \vec{q}, E^{(0)}) \quad (31.2)$$

допускает гладкое семейство замкнутых фазовых кривых (29.2):

$$\begin{aligned} \Lambda^1(E^{(0)}) &= \{z = Z(t, E^{(0)})\}, \quad E' \leq E^{(0)} \leq E'', \\ Z(t, E^{(0)}) &= (\vec{P}(t, E^{(0)}), \vec{Q}(t, E^{(0)})), \end{aligned} \quad (31.3)$$

удовлетворяющих условию (29.3). Период по  $t$  траектории  $\Lambda^1(E^{(0)})$  будем обозначать через  $T(E^{(0)})$ .

Линеаризуем систему (31.2) в окрестности фазовой кривой (31.3). В результате получим систему в вариациях

$$\dot{a} = \mathcal{H}_{\text{var}}(\tau, E^{(0)})a, \quad (31.4)$$

где  $a(t, E^{(0)}) = (\vec{W}(t, E^{(0)}), \vec{Z}(t, E^{(0)}))^T$  – в общем случае комплексный  $2n$ -мерный вектор, а  $\mathcal{H}_{\text{var}}(t, E^{(0)})$  –  $2n \times 2n$ -матрица вида

$$\mathcal{H}_{\text{var}}(t, E^{(0)}) = \mathcal{J}\mathcal{H}_{zz}(t, E^{(0)}), \quad (31.5)$$

вычисленная в точках фазовой траектории  $\Lambda^1(E^{(0)})$ . Система (31.4) является линейной гамильтоновой системой с периодическими коэффициентами, и мы можем воспользоваться общей теорией Флоке для таких систем (см. раздел «Системы ОДУ с периодическими коэффициентами»).

Напомним, что решение  $a(t, E^{(0)})$  системы (31.4) называется решением Флоке, если существует константа  $\lambda$  – мультипликатор Флоке – такая, что

$$a(t + T(E^{(0)}), E^{(0)}) = \lambda a(t, E^{(0)}), \quad -\infty < t < \infty. \quad (31.6)$$

Мультипликаторы являются собственными числами матрицы монодромии системы (31.4). Числа  $\Omega$ , определяемые из условия  $\lambda = \exp[i\Omega T(E^{(0)})]$ , называются характеристическими показателями Флоке. Одним из очевидных решений Флоке системы (31.4) является вещественное решение

$$a_0(t, E^{(0)}) = (\vec{P}(t, E^{(0)}), \vec{Q}(t, E^{(0)}))^\top \quad (31.7)$$

с мультипликатором  $\lambda_0 = 1$ .

Предположим теперь, что выполнено условие: система (31.4) допускает набор из  $n - 1$  комплексных решений Флоке

$$a_k(t, E^{(0)}) = (\vec{W}_k(t, E^{(0)}), \vec{Z}_k(t, E^{(0)}))^\top, \quad k = \overline{1, n-1},$$

линейно независимых с решением  $a_0(t, E^{(0)})$  и удовлетворяющих условиям

$$\begin{aligned} \{a_i, a_j\} &= 0, \quad \{a_l, a_k^*\} = 2i\delta_{lk}, \quad i, j = \overline{0, n-1}; \quad l, k = \overline{1, n-1} \\ a_k(t + T(E^{(0)})) &= \exp[i\Omega_k(E^{(0)})T(E^{(0)})]a_k(t), \quad \text{Im } \Omega_k = 0, \end{aligned} \quad (31.8)$$

где фигурная скобка  $\{.,.\}$  означает кососкалярное произведение. Тогда комплексная  $n$ -мерная плоскость в  $\mathbb{C}^{2n}$ , натянутая на векторы  $a_j(t, E^{(0)})$  (31.8), называется комплексным ростком в точке  $(\vec{P}(t, E^{(0)}), \vec{Q}(t, E^{(0)}))$  на фазовой кривой  $\Lambda^1(E^{(0)})$  и обозначается  $r^n(t)$ . Семейство плоскостей  $\{r^n(t), 0 \leq t \leq T(E^{(0)})\}$  есть комплексный росток  $r^n(E^{(0)})$  на  $\Lambda^1(E^{(0)})$ . Совокупность геометрических объектов  $[\Lambda^1(E^{(0)}), r^n(E^{(0)})]$  является центральной конструкцией, определяющей квазиклассические ответы в спектральных квантовых задачах, соответствующих движению классической неинтегрируемой системы по неполномерным лагранжевым торам.

В дальнейшем будем предполагать, что указанное выше семейство  $T(E^{(0)})$ -периодических решений Флоке (31.8) построено. Для частного, но важного в приложениях случая, когда семейство функций Гамильтона (31.1) допускает циклическую переменную  $\varphi(\text{mod } 2\pi)$ , конструкция комплексного ростка приведена ниже.

◇ В теории динамических систем условие  $\text{Im } \Omega_k = 0$  означает устойчивость фазовой траектории  $z = Z(t)$  в линейном приближении.

## 32. Комплексный росток классических систем с одной циклической переменной

Рассмотрим часто встречающийся в приложениях случай, когда функция Гамильтона (31.1) допускает одну циклическую угловую переменную  $\varphi(\text{mod } 2\pi)$ . В этом случае всегда можно выделить специальное семейство замкнутых фазовых траекторий  $\Lambda^1(I)$ , отвечающих движению классической системы по равновесной окружности. Опишем кратко их конструкцию.

Обозначим через  $I$  канонически сопряженный импульс к переменной  $\varphi$ . Зафиксируем числовой интервал  $\Omega_I \ni I$  и потребуем выполнения условия

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial I}(\vec{p}, I, \vec{q}) = 0. \quad (32.1)$$

Введем на редуцированном фазовом пространстве  $\mathbb{R}_p^{n-1} \times \mathbb{R}_q^{n-1}$  однопараметрическое по  $I$  семейство функций Гамильтона

$$\tilde{\mathcal{H}}_I(\vec{p}, \vec{q}) = \mathcal{H}(\vec{p}, I, \vec{q}), \quad I \in \Omega_I. \quad (32.2)$$

Обозначим через  $Z_0(I) = (\vec{P}_0(I), \vec{Q}_0(I))$  критическую точку функции  $\tilde{\mathcal{H}}_I(\vec{p}, \vec{q})$ :

$$\nabla_p \tilde{H}_I|_{z=Z_0(I)} = \nabla_q \tilde{H}_I|_{z=Z_0(I)} = 0. \quad (32.3)$$

Тогда нетрудно убедиться, что при каждом фиксированном значении параметра  $I \in \Omega_I$  кривая

$$\Lambda^1(I) = \{\vec{p} = \vec{P}_0(I), p_\varphi = I, \vec{q} = \vec{Q}_0(I), \varphi = \omega_0(I)t\}, \quad (32.4)$$

где

$$\omega_0(I) = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial I}(\vec{P}_0(I), I, \vec{Q}_0(I)),$$

является замкнутой траекторией исходной гамильтоновой системы (31.2), лежащей на уровне энергии  $E^{(0)}(I) = \mathcal{H}|_{\Lambda^1(I)}$ . В конфигурационном пространстве  $\mathbb{R}_q^n$  траектории (32.4) отвечает движение по замкнутой равновесной окружности с периодом  $T(I) = 2\pi/\omega_0(I)$ .

Построение комплексного ростка  $r^n(I)$  на семействе  $\Lambda^1(I)$  существенно упрощается, поскольку в этом случае матрица (31.5)  $\mathcal{H}_{\text{var}}|_{\Lambda^1(I)} \equiv W(I)$  является постоянной и процедура построения решений Флоке, удовлетворяющих условиям существования «ростка» (31.8), сводится к решению задачи на собственные векторы и собственные значения для матрицы  $W(I)$ :

$$W(I)f_k = i\Omega_k(I)f_k, \quad \text{Im } \Omega_k = 0. \quad (32.5)$$

Тогда требуемые решения Флоке системы (31.4) с матрицей  $W(I)$  имеют вид

$$a_k(\tau, I) = e^{i\Omega_k(I)\tau} f_k. \quad (32.6)$$

### 33. Стационарные траекторно-когерентные состояния

Пусть  $\ell_{E^{(0)}} = \{\vec{q} = \vec{Q}(\tau, E^{(0)})\}$  – проекция замкнутой кривой  $\Lambda^1(E^{(0)})$  на конфигурационное пространство  $\mathbb{R}_q^n$ . Рассмотрим уравнение (29.4). В силу условия (29.3) в малой окрестности  $V_\delta(Q(t, E^{(0)}))$  каждой точки  $\vec{q} = \vec{Q}(t, E^{(0)})$  кривой  $\ell_{E^{(0)}}$  уравнение (29.4) однозначно и гладко разрешимо относительно  $t$  и, таким образом, задает параметризованное по  $t$  семейство гиперплоскостей

$$t = \tau(\vec{q}, E^{(0)}). \quad (33.1)$$

В дальнейшем для упрощения изложения примем соглашение  $A(\tau) \equiv A(t)|_{t=\tau(\vec{q})}$ .

Из векторов  $\vec{W}_j(t, E^{(0)})$  и  $\vec{Z}_j(t, E^{(0)})$ , образующих решения Флоке  $a_j(t, E^{(0)})$ ,  $j = \overline{0, n-1}$ , (31.8) составим квадратные  $n \times n$ -матрицы  $B(t, E^{(0)})$  и  $C(t, E^{(0)})$ :

$$B(t, E^{(0)}) = (\dot{\vec{P}}, \vec{W}_1, \dots, \vec{W}_{n-1}), \quad C(t, E^{(0)}) = (\dot{\vec{Q}}, \vec{Z}_1, \dots, \vec{Z}_{n-1}). \quad (33.2)$$

Матрица  $C(t, E^{(0)})$  невырождена, и тем самым определена симметричная матрица  $G(t, E^{(0)}) = B(t, E^{(0)})C^{-1}(t, E^{(0)})$  с неотрицательно определенной мнимой частью

$$\text{Im } G > 0. \quad (33.3)$$

Введем в окрестности  $V_\delta(\ell_{E^{(0)}})$  комплексную фазу

$$S(\vec{q}, E^{(0)}) = [\tilde{S}(t, \vec{q}, E^{(0)})]_{t=\tau(\vec{q})},$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{S}(t, \vec{q}, E^{(0)}) &= \int_0^t \langle \vec{P}(t', E^{(0)}), \dot{\vec{Q}}(t', E^{(0)}) \rangle dt' - E^{(0)}t + \\ &+ \langle \vec{P}(t, E^{(0)}), \Delta\vec{q} \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta\vec{q}, G(t, E^{(0)}) \Delta\vec{q} \rangle. \end{aligned} \quad (33.4)$$

Здесь и ниже  $\Delta\vec{q} = \vec{q} - \vec{Q}(t, E^{(0)})$ .

Векторам  $a_j(t, E^{(0)})$ ,  $a_j^*(t, E^{(0)})$  сопоставим операторы уничтожения и рождения

$$\begin{aligned} \hat{a}_0 &= \langle \dot{\vec{Q}}(t), \Delta\hat{p} \rangle - \langle \dot{\vec{P}}(t), \Delta\vec{q} \rangle, \\ \hat{a}_l &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\langle \vec{Z}_l(t), \Delta\hat{p} \rangle - \langle \vec{W}_l(t), \Delta\vec{q} \rangle), \\ \hat{a}_l^+ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\langle \vec{Z}_l^*(t), \Delta\hat{p} \rangle - \langle \vec{W}_l^*(t), \Delta\vec{q} \rangle), \quad l = \overline{1, n-1}, \end{aligned} \quad (33.5)$$

для которых в силу (31.8) выполняются коммутационные соотношения

$$\begin{aligned} [\hat{a}_0, \hat{a}_l] &= [\hat{a}_0, \hat{a}_l^+] = [\hat{a}_k, \hat{a}_l] = [\hat{a}_k^+, \hat{a}_l^+] = 0, \\ [\hat{a}_k, \hat{a}_l^+] &= \delta_{kl}. \end{aligned} \quad (33.6)$$

Введем «вакуумное» состояние

$$|0, t\rangle = N_0(\hbar) J^{-1/2}(t, E^{(0)}) \exp[(i/\hbar)S(\vec{q}, E^{(0)})], \quad (33.7)$$

где  $J(t, E^{(0)}) = \det C(t, E^{(0)})$ , и с помощью операторов рождения  $\hat{a}_l^+$  построим «представление чисел заполнения», т.е. набор функций вида

$$|\nu, t\rangle = \prod_{l=1}^{n-1} \frac{1}{\sqrt{\nu_l!}} (\hat{a}_l^+)^{\nu_l} |0, t\rangle. \quad (33.8)$$

Справедливо следующее утверждение.

**Утверждение 33.1.** *Функция  $|\nu, t\rangle$  (33.8) удовлетворяют уравнению (30.11) и условию (30.12).*

**Доказательство** первой части утверждения следует из того, что функции (33.8) являются квазиклассическими ТКС со специально выбранным базисом на ростке. Справедливость условия (30.12) непосредственно следует из (31.8).

◆ **Функции**

$$|\nu\rangle = |\nu, E^{(0)}\rangle = |\nu, t\rangle|_{t=\tau(\vec{q})}. \quad (33.9)$$

называются *стационарными квазиклассическими траекторно-когерентными состояниями* (сосредоточенными при  $\hbar \rightarrow 0$  в окрестности фазовой траектории  $\Lambda^1(E^{(0)})$ , удовлетворяющей условию (29.3)).



### 34. Условие квантования замкнутых орбит

Для построения квазиклассических спектральных серий оператора Шрёдингера  $\widehat{\mathcal{H}}$  выделим из семейства функций (33.8) функции, удовлетворяющие условию периодичности

$$|\nu, t + T(E^{(0)})\rangle = |\nu, t\rangle. \quad (34.1)$$

Покажем, что это условие приводит к квантованию типа Бора–Зоммерфельда семейства  $\Lambda^1(E^{(0)})$  и выделяет в области непрерывного изменения параметра  $E^{(0)}$  ( $E' \leq E^{(0)} \leq E''$ ) дискретный набор уровней энергии  $E_N(\hbar)$  и отвечающую им последовательность собственных функций  $\Psi_{E_N(\hbar)}$ .

Подставляя в (34.1) явный вид функции  $|\nu, t\rangle$  (33.8) с учетом формулы (31.8), получим условие квантования семейства  $[\Lambda^1(E^{(0)}), r^3(E^{(0)})]$  в виде

$$\begin{aligned} & \int_0^{T(E^{(0)})} \langle \vec{P}(t, E^{(0)}), \dot{\vec{Q}}(t, E^{(0)}) \rangle dt + \hbar T(E^{(0)}) E_1 = \\ & = 2\pi\hbar l + \hbar T(E^{(0)}) \left( \sum_{k=1}^2 \Omega_k(E^{(0)}) (\nu_k + \frac{1}{2}) \right) + O(\hbar^2). \end{aligned} \quad (34.2)$$

Отсюда следует, например, что равенство (34.1) будет заведомо выполнено, если выполнены условия

$$\int_0^{T(E^{(0)})} \langle \vec{P}(t, E^{(0)}), \dot{\vec{Q}}(t, E^{(0)}) \rangle dt = 2\pi\hbar l(\hbar), \quad (34.3)$$

$$E^{(1)} = \sum_{k=1}^2 \Omega_k(E^{(0)}) (\nu_k + 1/2), \quad (34.4)$$

где последовательность целых чисел  $l(\hbar)$  и параметр  $\hbar$  следует связать условием

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar l(\hbar) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{T(E^{(0)})} \langle \vec{P}(t, E_{\text{cl}}), \dot{\vec{Q}}(t, E_{\text{cl}}) \rangle dt.$$

Здесь  $E_{\text{cl}}$  – заданный уровень классической энергии электрона, отвечающий замкнутой орбите  $\Lambda^1(E^{(0)})$ . В этом случае условие (34.3) выделяет в окрестности  $E' \leq E_{\text{cl}} \leq E''$  дискретный набор значений энергии  $E_l^{(0)}(\hbar) = E_{\text{cl}}(\hbar l(\hbar))$  такой, что  $\lim_{\hbar \rightarrow 0} E_l^{(0)}(\hbar) = E_{\text{cl}}$ . Таким образом, условия (34.3), (34.4) определяют с точностью до  $O(\hbar^2)$  спектральную последовательность уровней энергии в следующем виде:

$$E_\nu(\hbar) = E_{l, \nu_1, \dots, \nu_{n-1}}(\hbar) = E_l^{(0)}(\hbar) + \hbar E_{l, \nu_1, \dots, \nu_{n-1}}^{(1)}(\hbar) + O(\hbar^2), \quad (34.5)$$

где

$$E_l^{(0)}(\hbar) = E_{\text{cl}}(\hbar l(\hbar)), \quad (34.6)$$

$$E_{l, \nu_1, \dots, \nu_{n-1}}^{(1)}(\hbar) = \sum_{k=1}^{n-1} \Omega_k(E_l^{(0)}(\hbar)) (\nu_k + \frac{1}{2}). \quad (34.7)$$

Покажем, что в разложении по  $\hbar$ ,  $\hbar \rightarrow 0$ , условия квантования (34.3), (34.4) эквивалентны с точностью до  $O(\hbar^2)$  условию квантования типа Бора–Зоммерфельда семейства  $\Lambda^1(E)$ , где  $E = E^{(0)} + \hbar E^{(1)}$ .

**Утверждение 34.1.** Пусть функция Гамильтона  $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{q})$  допускает гладкое семейство  $T = T(E)$ -периодических замкнутых кривых  $\Lambda^1(E) = \{\vec{p} = \vec{P}(t, E), \vec{q} = \vec{Q}(t, E)\}$  таких, что  $\mathcal{H}|_{\Lambda^1(E)} = E$ . Покажем, что если  $E = E^{(0)} + \hbar E^{(1)}$ , то с точностью до  $O(\hbar^2)$  условия квантования (34.7) и (34.2) эквивалентны.

Действительно, как следует из сравнения выражений (34.7) и (34.2), для доказательства данного утверждения достаточно убедиться в справедливости следующего соотношения:

$$\begin{aligned} & \oint_{\Lambda^1(E)} \langle \vec{P}(t, E), d\vec{Q}(t, E) \rangle = \\ & = \oint_{\Lambda^1(E^{(0)})} \langle \vec{P}(t, E^{(0)}), d\vec{Q}(t, E^{(0)}) \rangle + \hbar T(E^{(0)}) E^{(1)} + O(\hbar^2). \end{aligned} \quad (34.8)$$

В самом деле, в силу гладкой зависимости семейства  $\Lambda^1(E)$  от параметра  $E$  интеграл

$$W(E) = \oint_{\Lambda^1(E)} \langle \vec{P}(t, E), d\vec{Q}(t, E) \rangle$$

допускает разложение

$$W(E) = W(E^{(0)}) + \left( \frac{\partial W}{\partial E} \right)_{E=E^{(0)}} \hbar E^{(1)} + O(\hbar^2).$$

Расписав второе слагаемое, получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial W}{\partial E}(E) &= T(E) + \langle \vec{P}(T(E), E), \dot{\vec{Q}}(T(E), E) \rangle T'(E) + \\ &+ \left\langle \vec{P}(t, E), \frac{\partial \vec{Q}}{\partial E}(t, E) \right\rangle \Big|_0^{T(E)}. \end{aligned} \quad (34.9)$$

Для  $T(E)$ -периодической функции  $\vec{Q}(t, E)$  будем считать выполненными условия Дирихле. Воспользовавшись этим, разложим ее в ряд Фурье

$$\vec{Q}(t, E) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \vec{C}_n(E) \exp\left(i \frac{2\pi n t}{T(E)}\right).$$

Отсюда непосредственно следует

$$\frac{\partial \vec{Q}}{\partial E}(t, E) = -t \frac{T'(E)}{T(E)} \frac{\partial \vec{Q}}{\partial E}(t, E) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\partial \vec{C}_n(E)}{\partial E} \exp\left(i \frac{2\pi n t}{T(E)}\right). \quad (34.10)$$

Подставив (34.10) в (34.9) и воспользовавшись условием  $T(E)$ -периодичности функции  $P(t, E)$ , получим

$$\frac{\partial W}{\partial E}(E) = T(E). \quad (34.11)$$

В итоге выражение для  $W(E)$  принимает вид  $W(E) = W(E^{(0)}) + T(E^{(0)}) \hbar E^{(1)} + O(\hbar^2)$ , что и доказывает требуемое утверждение.

## Фаза Берри и квазиклассически сосредоточенные состояния

В настоящей главе с помощью квазиклассических траекторно-когерентных состояний, построенных в первой и второй главах, исследуется адиабатическая фаза Берри.

Построим сначала квазиклассические спектральные серии  $[|\nu, R\rangle, E_\nu(R)]$  оператора Шрёдингера, отвечающие нульмерным лагранжевым торам  $\Lambda^0(R)$ . Затем убедимся, что за время адиабатической эволюции состояния  $|\nu, R(0)\rangle$  приобретают фазу Берри, которая имеет чисто геометрический характер. Полученное выражение используем для вычисления фазы Берри обобщенного гармонического осциллятора. Результат вычислений совпадает с результатом М. Берри. Наконец, используем общие формулы для исследования фазы Берри в периодическом магнитном поле  $\vec{H}(t)$ . Часть необходимых технических результатов вынесена в приложения.

### 35. Квазиклассические спектральные серии, отвечающие нульмерным лагранжевым торам $\Lambda^0(R)$

Пусть  $\hat{\mathcal{H}}(R) = \mathcal{H}(-\hbar\partial/\partial\vec{q}, \vec{q}, R, \hbar)$ ,  $\vec{q} \in \mathbb{R}^n$ , – упорядоченный по Вейлю  $\hbar^{-1}$ -псевдодифференциальный скалярный оператор, зависящий от  $R = (R_1, \dots, R_N)$  вещественных параметров. Обозначим через  $\overset{0}{\mathcal{H}}(\vec{p}, \vec{q}, R) = \mathcal{H}(\vec{p}, \vec{q}, R, 0)$  главный символ оператора  $\hat{\mathcal{H}}(R)$ . Рассмотрим спектральную задачу

$$[\hat{\mathcal{H}}(R) - E]\Psi_E(\vec{q}, R, \hbar) = 0. \quad (35.1)$$

Требуется построить специальный класс приближенных по  $\text{mod } O(\hbar^{3/2})$  решений уравнения (35.1), отвечающих в квазиклассическом пределе  $\hbar \rightarrow 0$  устойчивой точке покоя классической системы с функцией Гамильтона  $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{q}, R)$ . Перечислим основные идеи, используемые при построении таких решений.

Пусть  $\Lambda^0(R) = \{\vec{p} = \vec{P}_0(R), \vec{q} = \vec{Q}_0(R)\}$  – точка покоя<sup>11</sup> функции  $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{q}, R)$ , т.е. выполнены условия

$$\mathcal{H}_{\vec{p}}(\vec{P}_0(R), \vec{Q}_0(R), R) = 0, \quad \mathcal{H}_{\vec{q}}(\vec{P}_0(R), \vec{Q}_0(R), R) = 0. \quad (35.2)$$

Точка покоя  $\Lambda^0(R)$  является невырожденной, если матрица

$$\mathcal{H}_{\text{var}}(R) = \begin{pmatrix} -\mathcal{H}_{qp} & -\mathcal{H}_{qq} \\ \mathcal{H}_{pp} & \mathcal{H}_{pq} \end{pmatrix} \Big|_{\Lambda^0(R)}$$

невырождена. Введем  $2n$ -мерный вектор  $a(t) = (\vec{W}(t), \vec{Z}(t))^\top$  и рассмотрим систему в вариациях

$$\dot{a}(t) = \mathcal{H}_{\text{var}}(R)a(t). \quad (35.3)$$

(Здесь и ниже точкой сверху обозначается производная по  $t$ .) Невырожденная точка покоя  $\Lambda^0(R)$  называется устойчивой в линейном приближении, если все решения системы в вариациях (35.3) ограничены при  $t \in (-\infty, \infty)$ . Тогда, если у классической системы существует невырожденная точка покоя  $\Lambda^0(R)$ , устойчивая в линейном приближении, то существует и  $n$  линейно независимых решений уравнения (35.3), удовлетворяющих условиям

<sup>11</sup>Точку покоя  $\Lambda^0(R)$  также называют нульмерным лагранжевым многообразием.

$$\{a_k, a_l^*\} = 2i\delta_{kl}, \quad \{a_k, a_l\} = 0, \quad k, l = \overline{1, n}, \quad (35.4)$$

где

$$a_k(t) = \exp(i\Omega_k(R)t) f_k(R), \quad \text{Im } \Omega_k(R) = 0. \quad (35.5)$$

Иначе говоря, набор чисел  $i\Omega_k(R)$  и векторов  $f_k(R) = (\vec{W}_k(t), \vec{Z}_k(R))^\top$  удовлетворяет системе

$$\mathcal{H}_{\text{var}}(R) f_k(R) = i\Omega_k(R) f_k(R). \quad (35.6)$$

Комплексная  $n$ -мерная плоскость, натянутая на векторы  $a_k(t)$ , называется комплексным ростком в точке  $\Lambda^0(R)$  и обозначается как  $r^n(\Lambda^0(R))$ .

Векторам  $f_k(R)$  и  $f_k^*(R)$  сопоставим операторы рождения и уничтожения согласно правилу

$$\begin{aligned} \hat{a}_k^+(R) &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \langle \vec{Z}_k^*(R), \Delta \hat{p} \rangle - \langle \vec{W}_k^*(R), \Delta \vec{q} \rangle \right), \\ a_k(R) &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left( \langle \vec{Z}_k(R), \Delta \hat{p} \rangle - \langle \vec{W}_k(R), \Delta \vec{q} \rangle \right), \end{aligned} \quad (35.7)$$

где

$$\Delta \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{q}} - \vec{P}_0(R), \quad \Delta \vec{q} = \vec{q} - \vec{Q}_0(R) \quad (35.8)$$

– операторы малых отклонений от положения равновесия  $\Lambda^0(R)$ . Операторы (35.7) в силу соотношений (35.4) удовлетворяют стандартным бозевским коммутационным соотношениям

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_l^+] = \delta_{kl}, \quad [\hat{a}_k, \hat{a}_l] = [\hat{a}_k^+, \hat{a}_l^+] = 0. \quad (35.9)$$

Из векторов  $\vec{W}_k(R)$  и  $\vec{Z}_k(R)$  составим квадратные  $n \times n$ -матрицы

$$B(R) = (\vec{W}_1(R), \dots, \vec{W}_n(R)), \quad C(R) = (\vec{Z}_1(R), \dots, \vec{Z}_n(R)). \quad (35.10)$$

Из (35.4) следует, что матрица  $C(R)$  невырождена. Тем самым можно определить симметричную матрицу  $Q(R) = B(R)C^{-1}(R)$  с положительно определенной мнимой частью  $\text{Im } Q(R) > 0$ .

Введем вакуумное состояние

$$|0, R\rangle = N_\hbar \frac{1}{\sqrt{\det C(R)}} \exp \frac{i}{\hbar} S(\vec{q}, R), \quad (35.11)$$

где комплексная фаза  $S(\vec{q}, R)$  записывается как

$$S(\vec{q}, R) = \langle \vec{P}_0(R), \Delta \vec{q} \rangle + \frac{1}{2} \langle \Delta \vec{q}, Q(R) \Delta \vec{q} \rangle, \quad (35.12)$$

а  $N_\hbar = (\pi\hbar)^{-n/4}$  – нормировочная константа:  $\langle 0, R | 0, R \rangle_{L_2} = 1$ . Определим теперь набор функций  $|\nu, R\rangle$  как результат действия операторов рождения  $\hat{a}_k^+(R)$  на вакуумное состояние (35.11)

$$|\nu, R\rangle = \prod_{k=1}^n \frac{1}{\sqrt{\nu_k!}} (\hat{a}_k^+)^{\nu_k} |0, R\rangle. \quad (35.13)$$

Тогда оказываются справедливыми следующие утверждения:

**Утверждение 35.1.** *Функции (35.13) с точностью до  $O(\hbar^{3/2})$  являются решением спектральной задачи (35.1), т.е.*

$$[\hat{H}(R) - E_\nu(R)] |\nu, R\rangle = O(\hbar^{3/2}) \quad (35.14)$$

с собственным значением

$$E_\nu = E_0(R) + \hbar \sum_{l=1}^n \Omega_l(R) (\nu_l + \frac{1}{2}) + O(\hbar^2), \quad (35.15)$$

где  $E_0 = \mathcal{H}(P_0(R), Q_0(R), R)$ .

**Утверждение 35.2.** *Функции (35.13) сосредоточены в окрестности точки  $Q_0(R)$  (проекции  $\Lambda^0(R)$  на конфигурационное пространство) и образуют полную ортонормированную систему*

$$\langle R, \nu' | \nu, R \rangle_{L_2} = \delta_{\nu\nu'}. \quad (35.16)$$

Набор состояний  $|\nu, R\rangle$  и отвечающих им собственных значений  $E_\nu(R)$  образует квазиклассическую спектральную серию оператора  $\hat{H}(R)$ , отвечающую нульмерному лагранжеву многообразию  $\Lambda^0(R)$ .

## 36. Траекторно-когерентные состояния и адиабатическая фаза Берри

### 36.1. Постановка задачи

Рассмотрим уравнение типа Шрёдингера

$$[-i\hbar\partial_t + \hat{H}(t)]\Psi(\vec{q}, t, \hbar) = 0, \quad (36.1)$$

$\vec{q} \in \mathbb{R}^n$ , где  $\hat{H}(t) = \mathcal{H}(-i\hbar\partial/\partial\vec{q}, \vec{q}, t, \hbar)$  – некоторый (вообще говоря, произвольно зависящий от  $t$ )  $\hbar^{-1}$ -псевдодифференциальный оператор с главным символом  $\mathcal{H}_0(\vec{p}, \vec{q}, t) = \mathcal{H}(\vec{p}, \vec{q}, t, 0)$ . Основываясь на методе комплексного ростка [32], для уравнения (36.1) можно построить приближенные по  $\text{mod } O(\hbar^{3/2})$  решения в форме волновых пакетов – квазиклассические траекторно-когерентные состояния (ТКС)  $\Psi_\nu(\vec{q}, t, \hbar) = |\nu, t\rangle$  (см., например, гл. II).

Следуя Берри, рассмотрим квантовый гамильтониан  $\hat{H}(t) = \hat{H}(R(t))$ , зависящий от времени  $t$  через набор медленно меняющихся  $T$ -периодических функций  $\{R_1(t), \dots, R_N(t)\} = R(t)$ . Обозначим через  $\mathcal{H}_0(\vec{p}, \vec{q}, R(t))$  главный символ оператора  $\hat{H}(R(t))$ . Для гамильтоновой системы (9.6), отвечающей функции  $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{q}, R(t))$ , положим в начальный момент времени

$$\vec{p}(t)|_{t=t_0} = \vec{P}_0(R_0), \quad \vec{q}(t)|_{t=t_0} = \vec{Q}_0(R_0). \quad (36.2)$$

где  $\Lambda^0(R_0) = \{\vec{P}_0(R_0), \vec{Q}_0(R_0)\}$ ;  $R_0 = R(t_0)$  является невырожденной и устойчивой в линейном приближении точкой покоя функции  $\mathcal{H}_0(\vec{p}, \vec{q}, R_0)$ . Соответственно, для системы в вариациях (9.7) выберем в качестве начальных условий набор векторов

$$a_k(t)|_{t=t_0} = f_k(R_0), \quad k = \overline{1, n}, \quad (36.3)$$

удовлетворяющих условиям (35.4) и (35.6) и образующих комплексный росток  $r^n(\Lambda^0(R_0))$  в точке  $\Lambda^0(R_0)$ . Таким образом, данные Коши (36.2) и (36.3) определяют геометрический объект  $[\Lambda^0(R_0), r^n(\Lambda^0(R_0))]$  – нульмерное лагранжево многообразие с комплексным ростком, которому по правилу (35.13), (35.14) отвечает квазиклассическая спектральная серия  $[E_\nu(R_0), |\nu, R_0\rangle]$  мгновенного гамильтониана  $\hat{H}(R_0)$ . Пусть  $z(t)$  – решение задачи Коши с начальными данными определяемыми уравнением (36.2). Проквантовав его методом комплексного ростка (см. гл. II), получим набор квазиклассических ТКС  $|\nu, t\rangle$ . Сравнивая явный вид функций  $|\nu, t\rangle$  и  $|\nu, R_0\rangle$ , легко убедиться в справедливости соотношения

$$|\nu, t\rangle|_{t=t_0} = |\nu, R_0\rangle. \quad (36.4)$$

Иными словами, при каждом фиксированном  $\nu$  функция  $|\nu, t\rangle$  есть решение задачи Коши (36.4) для уравнения Шрёдингера (36.1) с оператором Гамильтона  $\hat{H}(R(t))$ .

Построим теперь решение задачи Коши (36.4) в адиабатическом приближении. Решение будем проводить в предположении о невырожденности квазиклассического спектра (35.15) мгновенного гамильтониана  $\hat{H}(R(t))$  в каждый фиксированный момент времени.

### 36.2. Адиабатическая эволюция классической системы

Нашей целью является построение адиабатических решений гамильтоновой системы (9.6) с функцией Гамильтона  $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{q}, R(t))$  и отвечающей ей системы в вариациях (9.7) при адиабатическом изменении вектора  $R(t)$  в пространстве параметров  $(R_1, \dots, R_N)$ . Найдем решение системы Гамильтона и системы в вариациях в виде формального разложения по параметру  $T^{-1}$ , играющему роль параметра адиабатичности. Обозначим  $s = t/T$ . Тогда  $s$  имеет смысл медленного (безразмерного) времени с началом  $s_0 = t_0/T$ . Примем также обозначение

$$\tilde{R}(s) = R(t)|_{t=sT}. \quad (36.5)$$

Решение системы Гамильтона

$$\dot{z} = \partial_z J \mathcal{H}(z, R(t)), \quad z(t) = \begin{pmatrix} \vec{p}(t) \\ \vec{q}(t) \end{pmatrix}$$

ищем в виде

$$z(t) = Z^{(0)}(s) + T^{-1} \overset{1}{z}(s, \theta) + O(T^{-2}), \quad (36.6)$$

где  $\theta = \{T\Phi_1(s), \dots, T\Phi_N(s)\}$  – набор «быстрых» переменных, а вещественные функции  $\Phi_k(s)$ ,  $k = \overline{1, n}$ , не зависят от  $T$  и определяются из условий периодичности

$$\overset{1}{z}(s, \dots, \theta_k + 2\pi, \dots) = \overset{1}{z}(s, \theta). \quad (36.7)$$

Вычислим производную по  $t$  по формуле

$$\partial_t = T^{-1} \partial_s + \Phi'(s) \partial_\theta, \quad \Phi'(s) \partial_\theta = \sum_{j=1}^N \Phi'_j(s) \frac{\partial}{\partial \theta_j}$$

и, обозначив штрихом производную по «медленной» переменной  $s$ , получим

$$\frac{1}{T} Z^{(0)'} + \frac{1}{T} \Phi' \overset{1}{z}_{, \theta} = J \mathcal{H}_z(s) + \frac{1}{T} \mathcal{H}_{\text{var}}(s) \overset{1}{z} + O(T^{-2}), \quad (36.8)$$

где  $\mathcal{H}_z(s) = \mathcal{H}_z(z, \tilde{R}(s))|_{z=Z^{(0)}(s)}$ . В нулевом приближении найдем

$$\mathcal{H}_z(Z^{(0)}(s), \tilde{R}(s)) = 0. \quad (36.9)$$

Таким образом, вектор  $Z^{(0)}(s) = \begin{pmatrix} \overset{0}{p}(s) \\ \overset{0}{q}(s) \end{pmatrix}$  при каждом фиксированном  $s$  определяет стационарную точку  $\Lambda^0(\tilde{R}(s))$  функции  $\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{q}, \tilde{Q}(s))$ , что в принятых нами ранее обозначениях означает

$$\begin{aligned} \overset{0}{p}(s) &= \vec{P}_0(\tilde{R}(s)) = \vec{P}_0(R(t)), \\ \overset{0}{q}(s) &= \vec{Q}_0(\tilde{R}(s)) = \vec{Q}_0(R(t)). \end{aligned} \quad (36.10)$$

Далее из (36.8) в первом приближении следует уравнение на функцию  $\overset{1}{z}(s, \theta)$

$$\Phi'(s) \frac{\partial}{\partial \theta} \overset{1}{z} = \mathcal{H}_{\text{var}} \overset{1}{z} - Z^{(0)'(s)}, \quad (36.11)$$

удовлетворяющую, в соответствии с (36.2), начальному условию  $\overset{1}{z}(s, \theta)|_{s=s_0} = 0$ . Решение уравнений (36.11) будем искать в виде

$$\overset{1}{z}(s, \theta) = \sum_{k=1}^n \{C_k(s, \theta) f_k(s) + C_k^*(s, \theta) f_k^*(s)\}, \quad (36.12)$$

где  $f_k(s) = f_k(\tilde{R}(s))$  – собственные векторы мгновенной матрицы  $\mathcal{H}_{\text{var}}(s)$

$$\mathcal{H}_{\text{var}}(s)f_k(s) = i\Omega(\tilde{R}(s))f_k(s), \quad (36.13)$$

удовлетворяющие условиям (35.4). Таким образом,  $f_k(s)$ ,  $k = \overline{1, n}$ , образуют  $n$ -мерный комплексный росток в точке  $\Lambda^0(\tilde{R}(s))$ . Подстановка (36.12) в (36.11) с учетом дополнительного<sup>12</sup> условия  $2\pi$ -периодичности (36.7) по всем «быстрым» переменным  $\theta_k$ , приводит к определению функций

$$\Phi_k(s) = \int_{s_0}^s \Omega_k(\tilde{R}(s)) ds \quad (36.14)$$

и коэффициентов

$$C_k(s, \theta) = \frac{1}{2\Omega_k(\tilde{R}(s))} \{f_k^*(s), Z^{(0)}(s)\} + \frac{1}{2}B_k(s) \exp(i\theta_k). \quad (36.15)$$

В выражения (36.15) вошли произвольные функции  $B_k(s)$ , которые могут быть определены в следующем приближении и выбираются таким образом, чтобы обеспечить выполнение начального условия  $C_k(s, \theta)|_{s=s_0} = 0$ . Тогда решение уравнения (36.11) имеет вид

$$\overset{1}{z}(s, \theta) = \text{Re} \left\{ \sum_{k=1}^n f_k(s) \left( \frac{1}{\Omega_k(\tilde{R}(s))} \{f_k^*(s), Z^{(0)'}(s)\} + B_k(s)e^{i\theta_k} \right) \right\}. \quad (36.16)$$

В результате функция (36.6) с учетом (36.10) и (36.11) является приближенным по  $\text{mod } O(T^{-2})$  решением системы Гамильтона (0.1) и описывает адиабатическую эволюцию классической системы.

Перейдем теперь к построению приближенных по  $\text{mod } O(T^{-2})$  решений системы в вариациях ((9.7)). Решение ищем в виде

$$a_k(t) = \overset{0}{a}_k(s, \theta_k) + T^{-1} \overset{1}{a}_k(s, \Theta) + O(T^{-2}), \quad k = \overline{1, n}, \quad (36.17)$$

где через  $\Theta$  мы обозначим набор быстрых переменных  $\Theta = (\theta, \theta_{lm}, \tilde{\theta}_{lm})$ ,  $l, m = \overline{1, n}$ , в который, помимо переменных  $\theta$  (см. формулы (36.6) и (36.14)), вошли также переменные  $\theta_{lm} = T\Phi_{lm}(s)$ ,  $\tilde{\theta}_{lm} = T\tilde{\Phi}_{lm}(s)$ , функции  $\Phi_{lm}$  и  $\tilde{\Phi}_{lm}$  подлежат определению. Подставив (36.6) и (36.17) в уравнение (9.7), найдем

$$\begin{aligned} & \frac{1}{T} \frac{\partial \overset{0}{a}_k}{\partial s} + \Phi'_k(s) \frac{\partial \overset{0}{a}_k}{\partial \theta_k} + \frac{1}{T} \Phi'(s) \frac{\partial \overset{1}{a}_k}{\partial \Theta} = \\ & = \mathcal{H}_{\text{var}}(s) \overset{0}{a}_k + \frac{1}{T} \mathcal{H}_{\text{var}}(s) \overset{1}{a}_k + \frac{1}{T} \mathcal{H}_{\text{var}}(s, \theta) \overset{0}{a}_k + O(T^{-2}), \end{aligned} \quad (36.18)$$

где

$$\begin{aligned} \overset{1}{\mathcal{H}}_{\text{var}}(s, \theta) &= \langle \overset{1}{z}(\theta, s), \partial_z \rangle \mathcal{H}_{\text{var}}(z, s) \Big|_{z=z(s)}, \\ \Phi'(s) \frac{\partial \overset{1}{a}_k}{\partial \Theta} &= \sum_{j=1}^N \Phi'_j(s) \frac{\partial \overset{1}{a}_k}{\partial \theta_j} + \sum_{j,m=1}^N \Phi'_{jm}(s) \frac{\partial \overset{1}{a}_k}{\partial \theta_{jm}}. \end{aligned} \quad (36.19)$$

Отсюда в нулевом приближении с учетом (36.14) получим уравнение

$$\Omega_k(\tilde{R}(s)) \frac{\partial \overset{0}{a}_k}{\partial \theta_k} = \mathcal{H}_{\text{var}}(s) \overset{0}{a}_k, \quad (36.20)$$

<sup>12</sup>Условие  $2\pi$ -периодичности по быстрым переменным  $\theta$  позволяет определить функции  $\Phi_k$  (36.6) и выбрать интересующее нас решение из полного интеграла уравнения (36.18).

решив которое, найдем

$$a_k^0(s, \theta_k) = f_k(s) e^{i(\theta_k + \mathcal{N}_k(s))}. \quad (36.21)$$

В решения (36.21) вошли функции  $\mathcal{N}_k(s)$ , которые остались неопределенными в этом приближении. Однако из условия нормировки (35.4) следует, что  $\text{Im } \mathcal{N}_k(s) = 0$ . Из условия (36.3) найдём, что  $\mathcal{N}_k(s_0) = 0$ .

В следующем порядке по  $T^{-1}$  из уравнения (36.18) с учетом (36.21) получим

$$\Phi'(s) \frac{\partial a_k^1}{\partial \Theta} - \mathcal{H}_{\text{var}}(s) a_k^1 = e^{i(\theta_k + \mathcal{N}_k(s))} \{ \mathcal{H}_{\text{var}}^1(s, \theta) f_k - i \mathcal{N}'_k(s) f_k - f'_k(s) \}. \quad (36.22)$$

По аналогии с (36.12) решение уравнения (36.22) ищем в виде

$$a_k^1(s, \Theta) = \sum_{l=1}^n \{ b_k^l(s, \theta, \theta_{lk}) f_l(s) + \tilde{b}_k^l(s, \theta, \theta_{lk}) f_l^*(s) \} e^{i(\theta_k + \mathcal{N}_k(s))}. \quad (36.23)$$

Тогда после подстановки (36.23) в (36.22) получим следующую систему уравнений на коэффициенты  $b_k^l, \tilde{b}_k^l$ :

$$\begin{aligned} & \sum_{m=1}^n \Omega_m \frac{\partial b_k^l}{\partial \theta_m} + \Phi'_{lk} \frac{\partial b_k^l}{\partial \theta_{lk}} + i(\Omega_k - \Omega_l) b_k^l = \\ & = -\frac{i}{2} (\{ f_l, f'_k \} + 2 \mathcal{N}'_k \delta_{kl} - \{ f_l, \mathcal{H}_{\text{var}}^1(s, \theta) f_k \}); \end{aligned} \quad (36.24)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{m=1}^n \Omega_m \frac{\partial \tilde{b}_k^l}{\partial \theta_m} + \tilde{\Phi}'_{lk} \frac{\partial \tilde{b}_k^l}{\partial \theta_{lk}} + i(\Omega_k - \Omega_l) \tilde{b}_k^l = \\ & = \frac{i}{2} (\{ f_l, f'_k \} - \{ f_l, \mathcal{H}_{\text{var}}^1(s, \theta) f_k \}). \end{aligned} \quad (36.25)$$

Требование  $2\pi$ -периодичности функций  $b_k^l$  по всем переменным  $\Theta$  эквивалентно в данном случае выполнению следующих условий:

$$\mathcal{N}_k(s) = -\frac{1}{2} \int_{s_0}^s ds \left\{ f_k^*, \left[ \frac{d}{ds} f_k - \mathcal{H}_{\text{var}}^0(\tilde{R}(s)) f_k \right] \right\} \quad (36.26)$$

и

$$\Phi_{lk}(s) = \Phi_k(s) - \Phi_l(s), \quad (36.27)$$

где матрица  $\mathcal{H}_{\text{var}}^0(\tilde{R}(s))$  в (36.26) есть не зависящая от переменных  $\theta$  часть матрицы (36.19), т.е.

$$\mathcal{H}_{\text{var}}^1(s, \theta) = \mathcal{H}_{\text{var}}^0(\tilde{R}(s)) + \text{Re} \left( \sum_{m=1}^n \mathcal{H}_{\text{var}}^m(\tilde{R}(s)) e^{i\theta_m} \right). \quad (36.28)$$

Аналогичное условие на коэффициенты  $\tilde{b}_k^l$  приводит к определению функций  $\tilde{\Phi}_{lk}(s)$ :

$$\tilde{\Phi}_{lk}(s) = \Phi_k(s) + \Phi_l(s). \quad (36.29)$$

Теперь, используя (36.26)–(36.29), получим явный вид функций  $b_k^l$  и  $\tilde{b}_k^l$ :

1) для  $k = l$

$$b_k^k(s, \theta) = b_k(s) + \sum_{m=1}^n \frac{1}{4\Omega_m} \left( \{ f_k^*, \mathcal{H}_{\text{var}}^m(\tilde{R}(s)) f_k \} e^{i\theta_m} - \right.$$



$$-\left\{ f_k^*, \left( \mathcal{H}_{\text{var}}^m(\tilde{R}(s)) \right)^* f_k \right\} e^{-i\theta_k} \Big); \quad (36.30)$$

2) для  $k \neq l$

$$\begin{aligned} b_k^l(s, \theta) &= b_k^l(s) e^{i(\theta_l - \theta_k)} + \\ &+ \frac{1}{4} \sum_{m=1}^n \left[ \frac{\{f_l^*, \mathcal{H}_{\text{var}}^m(\tilde{R}(s)) f_k\}}{\Omega_m + \Omega_k - \Omega_l} e^{i\theta_m} - \frac{\{f_l^*, (\mathcal{H}_{\text{var}}^m(\tilde{R}(s)))^* f_k\}}{\Omega_m - \Omega_k + \Omega_l} e^{-i\theta_m} \right] - \\ &- \frac{1}{2(\Omega_k - \Omega_l)} \left\{ f_l^*, \left[ \frac{d}{ds} - \mathcal{H}_{\text{var}}^0(\tilde{R}(s)) \right] f_k \right\}; \end{aligned} \quad (36.31)$$

3) для любых  $k$  и  $l$

$$\begin{aligned} \tilde{b}_k^l(s, \theta) &= \tilde{b}_k^l(s) e^{i(\theta_l - \theta_k)} - \\ &- \frac{1}{4} \sum_{m=1}^n \left[ \frac{\{f_l, \mathcal{H}_{\text{var}}^m(\tilde{R}(s)) f_k\}}{\Omega_m + \Omega_k + \Omega_l} e^{i\theta_m} - \frac{\{f_l, (\mathcal{H}_{\text{var}}^m(\tilde{R}(s)))^* f_k\}}{\Omega_m - \Omega_k - \Omega_l} e^{-i\theta_m} \right] - \\ &- \frac{1}{2(\Omega_k + \Omega_l)} \left\{ f_l, \left[ \frac{d}{ds} - \mathcal{H}_{\text{var}}^0(\tilde{R}(s)) \right] f_k \right\}. \end{aligned} \quad (36.32)$$

Вошедшие в выражения (36.30)–(36.32) функции  $b_k^l(s)$  и  $\tilde{b}_k^l(s)$  определяются из последующих приближений, причем  $b_k^l(s_0)$  и  $\tilde{b}_k^l(s_0)$  удовлетворяют условиям

$$b_k^l(s, \theta)|_{s=s_0} = \tilde{b}_k^l(s, \theta)|_{s=s_0} = 0.$$

Последнее непосредственно следует из условий (36.3), (36.23) и (36.17).

◇ Сделанное предположение о невырожденности квазиклассического спектра (35.14) означает, что между частотами  $\Omega_1, \dots, \Omega_n$  нет резонансных соотношений  $l_1\Omega_1 + \dots + l_n\Omega_n = 0$ , где  $l_1, \dots, l_n$  – целые числа. Это условие использовалось при выводе соотношений (36.30)–(36.32).

### 36.3. Фаза Берри

Вернемся теперь к адиабатическому решению задачи Коши (36.4). Из результатов предыдущего параграфа следует:

1. для решения системы Гамильтона (9.6), удовлетворяющего начальному условию (36.2), согласно (36.6) и (36.10), получим

$$\begin{aligned} \vec{p}(t) &= \vec{P}_0(R(t)) + O(T^{-1}), \\ \vec{q}(t) &= \vec{Q}_0(R(t)) + O(T^{-1}); \end{aligned} \quad (36.33)$$

2. решения системы в вариациях (9.7), отвечающие начальному условию (36.3), согласно равенствам (36.17), (36.21) и (36.28), имеют вид

$$a_k(t) = a_k(R(t)) \exp \left[ i \int_{t_0}^t dt \Omega_k(R(t)) + i \int_{t_0}^t dt \Omega_k^1(R(t)) \right] + O(T^{-1}), \quad (36.34)$$

где

$$\Omega_k^1(R(t)) = \frac{1}{2} \left\{ \dot{a}_k^*(R(t)), \left( \frac{d}{dt} - \mathcal{H}_{\text{var}}^0(R(t)) \right) a_k(R(t)) \right\}. \quad (36.35)$$

Вошедшая сюда матрица  $\mathcal{H}_{\text{var}}^0(R(t))$  определяется формулой (36.28) и, согласно (36.19) и (36.16), равна

$$\mathcal{H}_{\text{var}}^0(R(t)) = \langle \partial_z \mathcal{H}_{\text{var}}(z, R(t)), \dot{z}^0(R(t)) \rangle \Big|_{z=Z^{(0)}(s)}, \quad (36.36)$$

где  $\partial_z = (\partial/\partial \vec{p}, \partial/\partial \vec{q})^\top$ , а вектор  $\dot{z}^0(R(t))$  есть

$$\dot{z}^0(R(t)) = \sum_{k=1}^n \frac{1}{\Omega_k(R(t))} \text{Re} \left[ a_k(R(t)) \left\{ a_k^*(R(t)), \frac{d}{dt} Z^{(0)}(R(t)) \right\} \right]. \quad (36.37)$$

Подставив выражения (36.33) и (36.34) в формулу (11.6), после несложных вычислений получаем

$$\begin{aligned} |\nu, t\rangle &= |\nu, R(t)\rangle \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t E_\nu(R(t)) dt + \right. \\ &+ \left. \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \vec{P}_0(R(t)), d\vec{Q}_0(R(t)) \rangle + i \sum_{k=1}^n \int_{t_0}^t dt \Omega_k^1(R(t)) \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \right] + O(T^{-1}). \end{aligned} \quad (36.38)$$

Отсюда следует, что если квантовая система в начальный момент времени  $t = t_0$  находилась в собственном состоянии  $|\nu, R_0\rangle$ , отвечающем уровню энергии  $E_\nu(R_0)$ , то за время  $t = [t_0, t_0 + T]$  при адиабатическом изменении вектора  $R = R(t)$ , где  $R(t+T) = R(t)$ , система возвращается в исходное состояние, приобретая дополнительную фазу. В результате для фазы Берри получим

$$\gamma_\nu(T) = \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \vec{P}_0(R(t)), d\vec{Q}_0(R(t)) \rangle + \sum_{k=1}^n \int_{t_0}^t dt \Omega_k^1(R(t)) \left( \nu_k + \frac{1}{2} \right) + O(\hbar). \quad (36.39)$$

Фаза (36.39) имеет чисто геометрический характер. Действительно,

$$\begin{aligned} \gamma_\nu(T) &= \gamma_\nu(C) = \frac{i}{\hbar} \oint_C \left\langle \vec{P}_0(R), \frac{\partial \vec{Q}_0(R)}{\partial R_i} \right\rangle dR_i + \\ &+ \sum_{k=1}^n \oint_C \left\{ a_k^*, \mathcal{T}_k^{(i)}(R) \right\} \left( \nu_k + 1/2 \right) dR_i, \end{aligned} \quad (36.40)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_k^{(i)}(R) &= \frac{1}{2} \frac{\partial a_k(R)}{\partial R_i} - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^n \frac{1}{\Omega_l(R)} \times \\ &\times \left[ \text{Re} \left( \langle \partial_z \mathcal{H}_{\text{var}}(z, R), a_l(R) \rangle \Big|_{z=Z^{(0)}(R)} \left\{ a_l^*(R), \frac{\partial Z^{(0)}(R)}{\partial R_i} \right\} \right) a_k(R) \right]. \end{aligned} \quad (36.41)$$

Здесь  $C$  – замкнутый контур, вдоль которого в пространстве параметров  $(R_1, \dots, R_N)$  движется конец вектора  $R(t)$ ,  $t \in [0, T]$ . В заключение подчеркнем следующий факт. Согласно (36.40) и (36.41), адиабатическая фаза Берри  $\gamma_\nu(C)$  полностью определяется двумя геометрическими объектами:

1) фазовой траекторией  $\Lambda^0(R) = (\vec{P}_0(R), \vec{Q}_0(R))$ ,  $R \in C$ , – невырожденной и устойчивой в линейном приближении точки покоя системы Гамильтона;

2) комплексным ростком  $r^n(\Lambda^0(R(t)))$ , образованным из  $n$  линейно независимых собственных векторов  $f_k(R(t))$ ,  $k = \overline{1, n}$ , матрицы  $\mathcal{H}_{\text{var}}(R)$ , нормированных условием (35.4).

### 37. Фаза Берри для обобщенного гармонического осциллятора

Проиллюстрируем полученные выше результаты на ставшем уже классическим примере одномерного обобщенного гармонического осциллятора, описываемого гамильтонианом

$$\widehat{\mathcal{H}}(t) = \frac{1}{2}[\mu(t)\hat{p}^2 + \sigma(t)\hat{q}^2 + \rho(t)(\hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p})], \quad (37.1)$$

где  $R = (\mu, \sigma, \rho)$  суть параметры, задающие адиабатическую эволюцию квантовой системы. Оператору (37.1) отвечает классический гамильтониан

$$\mathcal{H}(p, q, R(t)) = \frac{1}{2}[\mu(t)p^2 + \sigma(t)q^2 + 2\rho(t)pq]. \quad (37.2)$$

При  $\rho^2 \neq \mu\sigma$  функция (37.2) имеет единственную точку покоя  $\Lambda^0 = (P_0 = 0, Q_0 = 0)$ . Требование устойчивости в линейном приближении точки  $\Lambda^0$  приводит к условию  $\rho^2 < \mu\sigma$ . В этом случае спектральная задача для матрицы  $\mathcal{H}_{\text{var}}(R)$  допускает следующее решение:

$$a(R) = \frac{1}{\sqrt{\mu\Omega(R)}} \begin{pmatrix} -\rho + i\Omega(R) \\ \mu \end{pmatrix}, \quad (37.3)$$

где  $\Omega(R) = \eta\sqrt{\mu\sigma - \rho^2}$ ,  $\eta = \text{sign } \mu$  и  $\{a(R), a^*(R)\} = 2i$ . Но тогда для фазы Берри, согласно формуле (36.41), получим

$$\begin{aligned} \gamma_\nu(C) &= \frac{1}{2}(\nu + \frac{1}{2}) \oint_C \{a^*(R), \frac{\partial}{\partial R_i} a(R)\} dR_i = \\ &= (\nu + \frac{1}{2}) \oint_C \frac{1}{2\sqrt{\mu\sigma - \rho^2}} \left( d\rho - \frac{\rho}{\mu} d\mu \right), \end{aligned} \quad (37.4)$$

что совпадает с результатами Берри.

### 38. Фаза Берри релятивистской заряженной частицы во внешнем периодическом электромагнитном поле

Пусть для квантовой системы с гамильтонианом

$$\mathcal{H}(\vec{p}, \vec{x}) = eA_0(\vec{x}) + \sqrt{c^2\vec{\mathcal{P}}^2 + m_0^2c^4}$$

электромагнитное поле задано потенциалами вида

$$A_0(t) = \frac{\mu(t)}{2}(\vec{r})^2, \quad \vec{A}(t) = \frac{1}{2}\vec{H}(t) \times \vec{r}, \quad (38.1)$$

где  $\vec{r}$  – радиус-вектор, а  $\mu(t) < 0$ ,  $\vec{H}(t)$  – набор произвольных  $T$ -периодических функций, определяющих адиабатическую эволюцию квантовой системы. Мгновенное состояние квантовой системы характеризуется набором параметров  $R = (\mu, \vec{H})$ .

Для потенциала (38.1) магнитная компонента поля совпадает с вектором  $\vec{H}(t)$ , а электрическая равна  $\vec{E}(t) = -\dot{\vec{H}}(t)/2c - \mu(t)\vec{r}$ . Классическое движение электрона в этом случае описывается системой уравнений

$$\dot{\vec{r}} = \frac{c^2}{\varepsilon(t)} \dot{\vec{P}}, \quad \dot{\vec{p}} = -e\mu(t)\vec{r} + \frac{ec}{2\varepsilon(t)} \vec{P} \times \dot{\vec{H}}(t), \quad (38.2)$$

где  $\vec{P} = \vec{p} - (e/c)\vec{A}(t)$  – кинетический импульс,  $\varepsilon(t) = \sqrt{c^2\vec{P}^2 + m^2c^4}$ , а  $e = -e_0$  – заряд электрона. Как видно из (38.2), возможна лишь единственная точка покоя  $\Lambda^0 = (\vec{p}_0 = 0, \vec{r}_0 = 0)$ . Систему уравнений (35.6) для определения собственных векторов  $a(R) = \begin{pmatrix} \vec{W}^{(R)} \\ \vec{Z}^{(R)} \end{pmatrix}$  матрицы  $\mathcal{H}_{\text{var}}(R)$  в точке  $\Lambda^0$  можно представить в виде

$$\frac{e}{2mc} \vec{W} \times \vec{H} - \left( e\mu + \frac{e^2}{4mc^2} \vec{H}^2 \right) \vec{Z} + \frac{e^2}{4mc^2} \langle \vec{H}, \vec{Z} \rangle = i\Omega \vec{W}, \quad (38.3)$$

$$\vec{W} = im\Omega \vec{Z} + \frac{e}{2c} \vec{H} \times \vec{Z}. \quad (38.4)$$

Подставив (38.4) в (38.3), получим уравнение на  $\vec{Z}$ :

$$\frac{ie\Omega}{c} \vec{H} \times \vec{Z} = (\Omega^2 - e\mu/m) \vec{Z}. \quad (38.5)$$

В пространстве параметров  $\vec{H} = (H_1, H_2, H_3)$  перейдем к сферической системе координат  $(r, \theta, \varphi)$ :

$$H_1 = r \sin \theta \cos \varphi, \quad H_2 = r \sin \theta \sin \varphi, \quad H_3 = r \cos \theta.$$

Тогда решение уравнения (35.6) можно представить в виде

$$a_0(R) = \begin{pmatrix} i\sqrt{m\Omega_1(R)} \vec{n}_r(R) \\ 1 \\ \sqrt{m\Omega_1(R)} \vec{n}_r(R) \end{pmatrix}, \quad \Omega_1(R) = \sqrt{e\mu/m}, \quad (38.6)$$

$$a_\eta(R) = \begin{pmatrix} i \\ 2N(R) (\vec{n}_\theta(R) - i(-1)^{1+\eta} \vec{n}_\varphi(R)) \\ N(R) (\vec{n}_\theta(R) - i(-1)^{1+\eta} \vec{n}_\varphi(R)) \end{pmatrix}, \quad \eta = 1, 2, \quad (38.7)$$

$$\Omega_\eta = -(-1)^{1+\eta} \frac{er}{2mc} + \sqrt{\frac{e\mu}{m} + \frac{e^2r^2}{4m^2c^2}},$$

где  $N(R) = [e\mu/m + e^2r^2/(4m^2c^2)]^{-1/4}$ , а  $(\vec{n}_r, \vec{n}_\theta, \vec{n}_\varphi)$  – орты сферической системы координат. Тогда для фазы Берри  $\gamma_\nu(C)$  (36.40), индуцированной адиабатическим движением комплексного ростка, следует

$$\begin{aligned} \gamma_\nu(C) &= - \sum_{\eta=1}^2 (-1)^{1+\eta} (\nu_\eta + 1/2) \int_{\Sigma(\partial\Sigma=C)} \langle d\vec{n}_\theta(R) \wedge d\vec{n}_\varphi(R) \rangle = \\ &= (\nu_2 - \nu_1) \int_{\Sigma(\partial\Sigma=C)} \frac{H_1 dH_2 \wedge dH_3 - H_2 dH_1 \wedge dH_3 + H_3 dH_1 \wedge dH_2}{|\vec{H}|^3}. \end{aligned} \quad (38.8)$$

Таким образом, из (38.8) следует, что фаза Берри электрона равна

$$\gamma_\nu(C) = (\nu_2 - \nu_1) \int_{\Sigma(\partial\Sigma=C)} d\vec{\Sigma} \frac{\vec{H}}{|\vec{H}|^3}. \quad (38.9)$$

Интеграл, стоящий в правой части (38.9), есть интеграл Гаусса, равный телесному углу  $\Omega(C)$ , под которым кривая  $C$  видна из начала координат. Поэтому окончательно имеем

$$\gamma_\nu(C) = (\nu_2 - \nu_1) \Omega(C). \quad (38.10)$$

В заключение мы хотим обратить внимание на то, что величина  $\gamma_\nu(C)$  отлична от нуля лишь при условии, что все компоненты магнитного поля  $\vec{H}(t)$  не равны нулю. Определяющим является и тот факт, что  $\mu(t) \neq 0$ , поскольку в противном случае, как следует из (38.6), исходное предположение о невырожденности спектра нарушается.

## Список литературы

1. Арнольд В.И. *Математические методы классической механики*. — М.: Наука, 1989. — 472 с.
2. Багров В.Г., Белов В.В., Задорожный В.Н., Трифонов А.Ю. *Методы математической физики*. Т. I: *Основы комплексного анализа. Элементы вариационного исчисления и теории обобщенных функций*. — Томск: Изд-во НТЛ, 2002. — 672 с.
3. Багров В.Г., Белов В.В., Задорожный В.Н., Трифонов А.Ю. *Методы математической физики*. Т. II, ч. 1: *Специальные функции*. — Томск: Изд-во НТЛ, 2002. — 352 с.
4. Багров В.Г., Белов В.В., Задорожный В.Н., Трифонов А.Ю. *Методы математической физики*. Т. II, ч. 2: *Уравнения математической физики*. — Томск: Изд-во НТЛ, 2002. — 646 с.
5. Багров В.Г., Белов В.В., Задорожный В.Н., Трифонов А.Ю. *Элементы современной математической физики*. — Томск: Изд-во ТПУ, 2004. — 182 с.
6. Багров В.Г., Белов В.В., Трифонов А.Ю. Квазиклассически сосредоточенные состояния уравнения Шрёдингера // *Лекционные заметки по теоретической и математической физике*. — Т. 1, ч. 1. — Казань, 1996. — С. 15-136.
7. Базь А.М., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской механике*. — М.: Наука, 1971.
8. Белов В.В., Доброхотов С.Ю. Квазиклассические асимптотики Маслова с комплексными фазами. I. Общий подход // *Теор. матем. физика*. — 1988. — Т. 92, № 2. — С. 215-254.
9. Бейтман Г., Эрдейи А. *Высшие трансцендентные функции. Гипергеометрическая функция. Функции Лежандра*. — М.: Наука, 1965. — 300 с.
10. Бейтман Г., Эрдейи А. *Высшие трансцендентные функции. Функции Бесселя. Функции параболического цилиндра. Ортогональные многочлены*. — М.: Наука, 1966. — 296 с.
11. Бейтман Г., Эрдейи А. *Высшие трансцендентные функции. Эллиптические и автоморфные функции. Функции Ламе и Матъе*. — М.: Наука, 1967. — 300 с.
12. Белов В.В., Воробьев Е.М. *Сборник задач по дополнительным главам математической физики*. — М.: Высшая школа, 1976. — 272 с.
13. Виницкий С.И., Дербов В.Л., Дубовик В.М. и др. Топологические фазы в квантовой механике и поляризационной оптике // *Усп. физ. наук*. — 1990. — Т. 160, № 6. — С. 1-49.
14. Воробьев Е.М., Дубнов В.Л., Маслов В.П. *Уравнения математической физики*. — М.: Из-во МИЭМ, 1973. — 136 с.
15. Гантмахер Ф.Р. *Теория матриц*. — М.: Наука, 1988. — 560 с.
16. Градштейн И.С., Рыжик И.М. *Таблицы интегралов, сумм рядов и произведений*. — М.: Наука, 1971. — 1108 с.
17. Додонов В.В., Манько В.И. Обобщенное соотношение неопределенностей в квантовой механике // *Тр. ФИАН*. — 1983. — Т. 152. — С. 145-193.
18. Ициксон К., Зюбер Ж.З. *Квантовая теория поля*. Т. 1. — М.: Мир, 1984. — 448 с.
19. Карасев М.В., Маслов В.П. *Нелинейные скобки Пуассона. Геометрия и квантование*. — М.: Наука, 1991. — С. 368.
20. Компсон Э. *Асимптотические разложения*. — М.: Мир, 1966. — 160 с.

21. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теория поля*. — М.: Наука, 1960. — 400 с.
22. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Механика*. — М.: Наука, 1965. — 204 с.
23. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Квантовая механика*. — М.: Наука, 1989. — 769 с.
24. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Питаевский П.С. *Квантовая электродинамика*. — М.: Наука, 1998. — 624 с.
25. Левитан Б.М. *Почти периодические функции*. — М.: Гостехиздат, 1953. — 396 с.
26. Лере Ж. *Лагранжев анализ и квантовая механика*. — М.: Мир, 1981. — 264 с.
27. Малкин М.А., Манько В.И. *Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем*. — М.: Наука, 1979. — 320 с.
28. Маслов В.П. *Теория возмущения и асимптотические методы*. — М.: Изд-во МГУ, 1965. — 549 с.
29. Маслов В.П. *Асимптотические методы и теория возмущения*. — М.: Наука, 1988. — 312 с.
30. Маслов В.П. *Операторные методы*. — М.: Наука, 1973. — 544 с.
31. Маслов В.П. *Комплексные марковские цепи и континуальный интеграл Фейнмана*. — М.: Наука, 1976. — 192 с.
32. Маслов В.П. *Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях*. — М.: Наука, 1977. — 384 с.
33. Маслов В.П. Уравнения самосопряженного поля // *Совр. пробл. матем.* — 1978. — Т. 11. — М.: ВИНТИ. — С. 153-234.
34. Маслов В.П. Метод ВКБ в многомерном случае // Дж. Хёдинг. *Введение в метод фазовых интегралов (метод ВКБ)*. — М.: Мир, 1965. — С. 177-237.
35. Маслов В.П., Федорюк М.В. *Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики*. — М.: Наука, 1976. — 296 с.
36. Переломов А.М. *Обобщенные когерентные состояния и их применение*. — М.: Наука, 1987. — 271 с.
37. Переломов А.М. *Интегрируемые системы классической механики и алгебры Ли*. — М.: Наука, 1990.
38. Рид М., Саймон Б. *Методы современной математической физики*. Т. 1. — М.: Мир, 1977. — 360 с.
39. *Специальные функции* / Под ред. М. Абрамовица, И. Стигана. — М.: Наука, 1979. — 832 с.
40. Трифонов А.Ю., Шаповалов А.В. *Элементы функционального анализа*. — Томск: Изд-во ТПУ, 2004. — 182 с.
41. Федорюк М.В. *Асимптотика: Интегралы и ряды*. — М.: Наука, 1987. — 544 с.
42. Федорюк М.В. *Обыкновенные дифференциальные уравнения*. — М.: Наука, 1980. — 352 с.
43. Bagrov V.G., Gitman D.M. *Exact Solution of Relativistic Wave Equation*. — Dordrecht: Kluwer, 1990.
44. Moore D.J. The calculation of nonadiabatic Berry phase // *Phys. Rep.* — 1991. — Vol. 210, No 1. — P. 1-43.
45. Robertson H.P. An indeterminacy relation for several observables and its classical interpretation // *Phys. Rev.* — 1934. — Vol. 46, No 9. — P. 794-801.
46. Shohat J.A., Tamarkin J.D. *The problem of moments*. — N.Y.: Amer. Math. Soc., 1950.

*Багров Владислав Гаврилович,  
Белов Владимир Владимирович,  
Трифонов Андрей Юрьевич*

**Методы математической физики  
Асимптотические методы**

Учебное пособие

Технический редактор *В.Н. Романенко*

Отпечатано с оригинал макета-макета авторов

Набор и верстка выполнены на компьютерной технике  
в издательской системе  $\text{TeX} - \text{L}^{\text{A}}\text{TeX}$   
с использованием семейства шрифтов Computer Modern

Подписано к печати 24.12.2004.  
Формат 60×84/8. Бумага офсетная.  
Печать RISO. Усл. печ. л. 965 . Уч.-изд. л. 874 .  
Тираж 150 экз. Заказ № 365. Цена свободная.  
Издательство ТПУ. 634050, г. Томск, проспект Ленина, 30



**В.Г. Багров, В.В. Белов, А.Ю. Трифонов**

**МЕТОДЫ  
МАТЕМАТИЧЕСКОЙ  
ФИЗИКИ**

**Асимптотические методы**