第 49 卷 第 1 期 2000 年 1 月
1000-3290/2000/49(01)/0017-03

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 49, No. 1, January, 2000

多维相空间中任意指数二次型算符的矩阵元*

徐秀玮　赵继德　任廷琦
(烟台师范学院物理系,烟台　264025)
(1999 年 5 月 22 日收到)

在多维相空间中,利用指数二次型算符的正规乘积和反正规乘积表示式,给出了任意指数二次型算符矩阵元的严格表达式.在能谱和能量本征函数未知的条件下,由此得到了哈密顿量为二次型系统的配分函数和波函数.

PACC: 0413; 0411

1　引　　言

众所周知,基本算符对易子为常数、哈密顿量为二次型的系统是量子理论诸多领域中可严格求解的典型系统之一,也是近似求解更复杂系统的基础.该系统的演化算符、传播子和密度算符等均为指数二次型的.在进行诸如跃迁概率、散射概率、波函数、密度矩阵元、配分函数等计算时都会遇到指数二次型算符矩阵元的计算.据我们所知,任意指数二次型算符矩阵元以往未被普遍、严格地给出过.只是最近文献[1]根据广义线性量子变换理论[2,3],给出了多模玻色系统任意指数二次型算符矩阵元的普遍结果,但未在相空间中具体研究.本文将在多维相空间中,给出指数二次型算符的一些基本矩阵元的具体、严格表达式、任意态之间的矩阵元计算公式和二次型哈密顿系统的配分函数、波函数.

2　矩阵元

在 n 维相空间中,坐标算符 $\hat{x}_l$ 和动量算符 $\hat{p}_k$ 满足对易关系 $\left[\hat{x}_l,\frac{\hat{p}_k}{\mathrm{i}\hbar}\right]=\delta_{lk}$,为方便引入下述算符记号

$$\Lambda=\left(\frac{\hat{p}_1}{\mathrm{i}\hbar},\cdots,\frac{\hat{p}_n}{\mathrm{i}\hbar},\hat{x}_1\cdots,\hat{x}_n\right)\equiv\left(\frac{\hat{P}}{\mathrm{i}\hbar},\hat{X}\right),\tag{1}$$

则任意指数二次型算符 $\hat{U}$ 可表示成

$$\hat{U}=\exp\left(\frac{1}{2}\Lambda N\Sigma_{\mathrm{B}}\widetilde{\Lambda}\right),\left(\widetilde{N\Sigma_{\mathrm{B}}}=N\Sigma_{\mathrm{B}}\right),\tag{2}$$

其中 $\Sigma_{\mathrm{B}}=\begin{pmatrix}0 & I\\ -I & 0\end{pmatrix}$ 而 I 为 $n\times n$ 单位矩阵.据文献[2—5]可分别给出 $\hat{U}$ 的正、反正规乘积形式

$$\begin{aligned}\hat{U}^{(n)}&=\frac{1}{\sqrt{\det C}}:\exp\left[\frac{1}{2\hbar^2}\hat{P}D\widetilde{C}^{-1}\widetilde{\hat{P}}\right.\\&\left.+\frac{1}{2}\hat{X}BC^{-1}\widetilde{\hat{X}}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{P}(C^{-1}-1)\widetilde{\hat{X}}\right]:,\\\hat{U}^{(a)}&=\frac{1}{\sqrt{\det A}}\ddagger\exp\left[\frac{1}{2\hbar^2}\hat{P}A^{-1}D\widetilde{\hat{P}}\right.\\&\left.+\frac{1}{2}X\widetilde{B}A^{-1}\widetilde{\hat{X}}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{P}(1-A^{-1})\widetilde{\hat{X}}\right]\ddagger,\end{aligned}\tag{3}$$

$:\cdots:$ 和 $\ddagger\cdots\ddagger$ 分别为正、反正规乘积符号,如 $:\hat{p}_l\hat{x}_l\hat{p}_l+\hat{x}_l\hat{p}_l\hat{x}_l:=\hat{p}_l^2\hat{x}_l+\hat{p}_l\hat{x}_l^2$ 和 $\ddagger\hat{p}_l\hat{x}_l\hat{p}_l+\hat{x}_l\hat{p}_l\hat{x}_l\ddagger=\hat{x}_l\hat{p}_l^2+\hat{x}_l^2\hat{p}_l$. $n\times n$ 的复矩阵 A, B, C 和 D 由下式确定,

$$\begin{pmatrix}A & D\\ \widetilde{B} & \widetilde{C}\end{pmatrix}=\mathrm{e}^N=M.\tag{4}$$

由 $\widetilde{N\Sigma_{\mathrm{B}}}=N\Sigma_{\mathrm{B}}$ 可以推知 M 为 $2n\times 2n$ 的复辛矩阵,即满足

$$\widetilde{M}\,\Sigma_{\mathrm{B}}M=\Sigma_{\mathrm{B}}.\tag{5}$$

对 n 维坐标本征态 $|X\rangle=|x_1\rangle\cdots|x_n\rangle$ 和动量本征态 $|P\rangle=|p_1\rangle\cdots|p_n\rangle$,由(3)式可得

$$\begin{aligned}\langle P|\hat{U}|X\rangle&=\langle P|\hat{U}^{(n)}(\hat{P},\hat{X})|X\rangle\\&=U^{(n)}(P,X)\langle P|X\rangle\\&=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n\det C}}\exp\left(\frac{1}{2\hbar^2}PD\widetilde{C}^{-1}\widetilde{P}\right.\end{aligned}$$

---

* 山东省自然科学基金(批准号:Y95A0202)资助的课题.

$$+\frac{1}{2}XBC^{-1}\widetilde{X}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}PC^{-1}\widetilde{X}\Big)\,;\qquad(6)$$

$$\begin{aligned}\langle X|\hat{U}|P\rangle&=\langle X|\hat{U}^{(a)}(\hat{P},\hat{X})|P\rangle\\&=U^{(a)}(P,X)\langle X|P\rangle\\&=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n\det A}}\exp\Big(\frac{1}{2\hbar^2}PA^{-1}D\widetilde{P}\\&\quad+\frac{1}{2}X\widetilde{B}A^{-1}\widetilde{X}-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}PA^{-1}\widetilde{X}\Big).\end{aligned}\qquad(7)$$

上二式的推导中用到了动量的本征波函数

$$\langle X|P\rangle=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}P\widetilde{X}}.\qquad(8)$$

由高斯积分

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-XG\widetilde{X}}\mathrm{d}X=\sqrt{\frac{\pi^n}{\det G}}\qquad(9)$$

(这里 $\mathrm{d}X=\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_n$,以下类似)、表象的完备性和(6)或(7)式,有

$$\begin{aligned}\langle X'|\hat{U}|X\rangle&=\frac{1}{\sqrt{(-2\pi)^n\det D}}\exp\Big(\frac{1}{2}XD^{-1}A\widetilde{X}\\&\quad+\frac{1}{2}X'\widetilde{C}D^{-1}\widetilde{X}'-XD^{-1}\widetilde{X}'\Big)\,;\end{aligned}\qquad(10)$$

$$\begin{aligned}\langle P'|\hat{U}|P\rangle&=\frac{1}{\sqrt{(-2\pi\hbar^2)^n\det B}}\exp\Big[\frac{1}{2\hbar^2}(PCB^{-1}\widetilde{P}\\&\quad+P'A\widetilde{B}^{-1}\widetilde{P}')-\frac{1}{\hbar}PB^{-1}\widetilde{P}'\Big].\end{aligned}\qquad(11)$$

(6),(7),(10)和(11)式为 $\hat{U}$的四个基本矩阵元,利用其中任一式可计算 $\hat{U}$在任意二态$|\varphi\rangle$和$|\psi\rangle$之间的矩阵元,例如

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\hat{U}|\psi\rangle&=\frac{1}{\sqrt{(-2\pi)^n\det D}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\Big(\frac{1}{2}XD^{-1}A\widetilde{X}\\&\quad+\frac{1}{2}X'\widetilde{C}D^{-1}\widetilde{X}'-XD^{-1}\widetilde{X}'\Big)\\&\quad\times\varphi^*(X')\psi(X)\mathrm{d}X'\mathrm{d}X,\end{aligned}\qquad(12)$$

式中 $\varphi^*(X')=\langle\varphi|X'\rangle$,$\psi(X)=\langle X|\psi\rangle$.

3 配分函数和波函数

在 n 维空间中,二次型系统的哈密顿量为

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\hat{P}\alpha\widetilde{\hat{P}}+\frac{1}{2}(\hat{P}\lambda\widetilde{\hat{X}}+\hat{X}\widetilde{\lambda}\widetilde{\hat{P}})+\frac{1}{2}\hat{X}\gamma\widetilde{\hat{X}}.\qquad(13)$$

其中 α,λ,γ 均为 $n\times n$ 实矩阵,且 $\widetilde{\alpha}=\alpha$,$\widetilde{\gamma}=\gamma$. 该系统的指数二次型算符 $\hat{U}=\mathrm{e}^{\beta\hat{H}}$表达成(2)式的形式,则

$$N=\beta\begin{pmatrix}\mathrm{i}\hbar\lambda & \hbar^2\alpha\\ \gamma & -\mathrm{i}\hbar\widetilde{\lambda}\end{pmatrix}.\qquad(14)$$

若 $\beta=\frac{t}{\mathrm{i}\hbar}$则 $\hat{U}$为演化算符,$\beta=-\frac{1}{KT}$(K 为玻尔兹曼常数,T 为热力学温标),则 $\hat{U}$为密度算符. 运用(10)(或(11)式),可得系统(13)式的配分函数

$$\begin{aligned}Z&=\mathrm{tr}(\mathrm{e}^{\beta\hat{H}})=\int_{-\infty}^{\infty}\langle X|\mathrm{e}^{\beta\hat{H}}|X\rangle\mathrm{d}X\\&=[\det D\det(D^{-1}A+\widetilde{C}D^{-1}-D^{-1}-\widetilde{D}^{-1})]^{-\frac{1}{2}}\\&=[(-1)^n\det(\mathrm{e}^N-1)]^{-\frac{1}{2}}\end{aligned}\qquad(15)$$

(同文献[1,6,7]用另外方法给出的结果一致),该式最后一步推导中用到了可由(5)式导出的关系

$$\widetilde{C}D^{-1}=\widetilde{D}^{-1}C,\ CA-\widetilde{BD}=I$$

和分块方阵的行列式

$$\det\begin{pmatrix}E & F\\ G & H\end{pmatrix}=\det E\det(H-GE^{-1}B),$$

并注意到 $\det(\mathrm{e}^N-1)=\det[(\mathrm{e}^N-1)\Sigma_{\mathrm{B}}^{-1}]$.

若系统从任意初态$|\psi(0)\rangle$开始演化,则 t 时刻的波函数为

$$\begin{aligned}\psi(X,t)&=\langle X|\hat{U}|\psi(0)\rangle\\&=\frac{\exp\Big(\frac{1}{2}X\widetilde{C}D^{-1}\widetilde{X}\Big)}{\sqrt{(-2\pi)^n\det D}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\Big(\frac{1}{2}X'D^{-1}A\widetilde{X}'\\&\quad-X'D^{-1}\widetilde{X}\Big)\psi(X',0)\mathrm{d}X'.\end{aligned}\qquad(16)$$

4 应用举例

考虑如下的二维耦合谐振子

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\frac{1}{2m}(\hat{p}_1^2+\hat{p}_2^2)+\frac{1}{2}m\omega^2(\hat{x}_1^2+\hat{x}_2^2)\\&\quad+f(\hat{p}_1\hat{x}_2-\hat{x}_1\hat{p}_2).\end{aligned}\qquad(17)$$

将(17)式同(13)式比较知 $\lambda=f\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}$,$\alpha=\frac{1}{m}$和$\gamma=m\omega^2$. 由(14)式,(4)式具体得到

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^N&=\begin{pmatrix}A & D\\ \widetilde{B} & \widetilde{C}\end{pmatrix}=\begin{bmatrix}\mathrm{ch}\hbar\beta\omega & \frac{\hbar}{m\omega}\mathrm{sh}\hbar\beta\omega\\ \frac{m\omega}{\hbar}\mathrm{sh}\hbar\beta\omega & \mathrm{ch}\hbar\beta\omega\end{bmatrix}\\&\quad\times\exp\Big[\mathrm{i}\hbar f\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}\Big],\end{aligned}\qquad(18)$$

将(18)式代入(15)式,并取 $\beta=-\frac{1}{KT}$,得系统(17)式的配分函数为

$$Z=\frac{1}{2\Big(\mathrm{ch}\frac{\hbar\omega}{KT}-\mathrm{ch}\frac{\hbar f}{KT}\Big)}.\qquad(19)$$

当取 $\beta=\frac{t}{\mathrm{i}\hbar}$,且系统初始波函数 $\psi(X,0)$ 具体给定后,将(18)式代入(16)式积分得其波函数,对此不再举例计算.

本文给出的(6),(7),(10)和(11)式是二次型系统的基本矩阵元,运用它们及表象的完备性可以计算系统的散射概率、跃迁概率、密度矩阵元等.在系统能谱未知的情况下可由(15)式方便地得出配分函数,计算波函数的(16)式中也不涉及 $\hat{H}$ 的本征波函数.本文已将有关的量子计算全部转化成了 C 数的运算.

[1] J. W. Pan, Q. X. Dong, Y. D. Zhang, G. Hou, X. B. Wang, *Phys. Rev.*, **E56**(1997), 2553.

[2] X. B. Wang, S. X. Yu, Y. D. Zhang, *J. Phys.*, **A27**(1994), 6563.

[3] X. B. Wang, Y. D. Zhang, J. W. Pan, *Chin. Phys. Lett.*, **13**(1996), 401.

[4] X. W. Xu, Y. D. Zhang, *Chin. Phys. Lett.*, **14**(1997), 812.

[5] X. W. Xu, Y. D. Zhang, *Commun. Theor. Phys.*, **31**(1999), 227.

[6] S. X. Yu, Y. D. Zhang, *Commun. Theor. Phys.*, **24**(1995), 185.

[7] J. W. Pan, Y. D. Zhang, G. G. Siu, *Chin. Phys. Lett.*, **14**(1997), 241.

MATRIX ELEMENTS OF ARBITRARY EXPONENTIAL QUADRATIC OPERATOR IN MULTI -DIMENSIONAL PHASE SPACE*

XU XIU-WEI　ZHAO JI-DE　REN TING-QI

(*Department of Physics, Yantai Teachers' University, Yantai*　264025)

(Received 22 May 1999)

ABSTRACT

Utilizing the normal and antinomal product representative of exponential quadratic operator, in multi-dimensional phase space we give the exact expressions of matrix element for arbitrary exponential quadratic operator. Thus we derive the partition function and wave function of the system of quadratic Hamiltonian without the knowledge of energy spectrum and eigenfunctions.

PACC: 0413; 0411

* Project supported by the Natural Science Foundation of Shandong (Grant No. Y95A0202).