УДК 517.984.46

Ю.Н. Орлов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Асимптотическая диагонализация полиномиальных квантовых гамильтонианов

Излагается метод асимптотической диагонализации полиномиальных квантовых гамильтонианов в представлении вторичного квантования при больших числах заполнения. Строится асимптотическая функция распределения собственных значений гамильтониана и вводится система неклассических специальных полиномов, являющихся его собственными функциями.

Ключевые слова: квантовый гамильтониан, законы сохранения, асимптотика спектра, специальные полиномы.

I. Введение

В ряде задач квантовой оптики [1, 2] процессы взаимодействия излучения с веществом моделируются гамильтонианами, полиномиальными в терминах операторов рождения и уничтожения, действующих в симметричном пространстве Фока [3]:

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^{p} \omega_k a_k^+ a_k^- + \sum_{(\alpha,\beta)\in J} b_{\alpha\beta} a^{+\alpha} a^{-\beta} + h.c. \quad (1.1)$$

В (1.1) принята мультииндексная запись монома $a^\alpha = a_1^{\alpha_1} \dots a_p^{\alpha_p}$, где индексы α (и аналогично β) принадлежат некоторому подмножеству целочисленной p-мерной решетки Z_+^p, в соответствии с размерностью задачи, определяемой количеством типов p частиц, так что вектор показателей степеней $(\alpha,\beta) \in J \subset Z_+^{2p}$ принадлежит некоторому конечному подмножеству J целочисленной $2p$-мерной решетки Z_+^{2p}. Величины ω_i и $b_{\alpha\beta}$ — действительные постоянные, $h.c.$ означает эрмитово сопряжение.

Операторы $a^\pm$ действуют в гильбертовом пространстве функций $\mathbf{H}$, реализованном как $L_2(R^p)$. Стандартный ортонормированный базис этого пространства, состоящий из собственных векторов оператора $\hat{H}_0 = \sum\limits_{k=1}^{p} \omega_k a_k^+ a_k^-$, обозначается через $\{|n\rangle\}$. Оператор $\hat{n}_k = a_k^+ a_k^-$ называется оператором числа частиц.

Пусть $\{|n\rangle_k\}$ — базис, отвечающий частице k-го типа. Операторы $a_k^\pm$ и $\hat{n}_k$ действуют на векторы своего базиса по формулам [3]:

$$a_k^- |n\rangle_k = \sqrt{n}|n-1\rangle_k, \quad a_k^- |n\rangle_k = \sqrt{n+1}|n+1\rangle_k, \\ \hat{n}_k |n\rangle_k = \sqrt{n}|n\rangle_k. \quad (1.2)$$

Для нескольких типов частиц, с каждым из которых связывается свое гильбертово пространство, базисом является тензорное произведение соответствующих одночастичных базисов: $|n\rangle = |n_1\rangle_1 \dots |n_p\rangle_p$.

Задача, решаемая в данной работе, состоит в отыскании асимптотики собственных значений и собственных функций гамильтониана (1.1) при больших числах заполнения, т. е. при больших собственных значениях оператора числа частиц.

Если множество J состоит только из элементов 0 и 1, гамильтониан (1.1) является квадратичным по операторам $a_k^\pm$ и может быть диагонализован каноническим преобразованием Боголюбова [3]. Если взаимодействие имеет более высокий порядок по степеням α, β, точное диагонализующее преобразование в терминах операторов $a^\pm$ в общем случае не известно, причем оно заведомо не будет каноническим.

При малых числах заполнения спектр и собственные функции могут быть найдены приближенно по теории возмущений. С одной стороны, сами полиномиальные модели вида (1.1) носят приближенный характер, и при сколь угодно больших числах заполнения могут быть неадекватны исходной постановке задачи. С другой стороны, при достаточно больших числах заполнения, но таких, что ряд теории возмущений все же сходится, низшие приближения могут давать весьма неточные оценки, а вычисление высших поправок трудоемко. В этом случае практическую важность приобретают методы асимптотического анализа спектра гамильтониана и нахождения соответствующего диагонализующего преобразования, т. е. асимптотических собственных функций. Идея построения такого преобразования при больших числах заполнения состоит в следующем.

Во многих практически важных примерах, содержащихся, например, в [1], гамильтониан (1.1) имеет полный набор законов сохранения. Если среди этих законов существует один, обеспечивающий ограниченность всех чисел заполнения, то на соответствующем инвариантном подпространстве задача на собственные значения в терминах чисел заполнения становится конечной. На этом подпространстве находится степенная асимптотика спектра с точностью $O(1/N)$ (главная асимптотика), где N есть собственное значение вышеуказанного «конечномерящего» закона сохранения [4]. Каждому значению N отвечает конечная эрмитова матрица гамильтониана на данном инвариантном подпространстве и соответствующая функция распределения его собственных значений. Затем изучается сходимость последовательности функций распределения собственных значений при $N \to +\infty$.

В данной работе формулируется метод асимптотической диагонализации полиномиальных гамильтонианов вида (1.1), имеющих полный набор законов сохранения.

II. Матрица полилинейного гамильтониана

Чтобы избежать непринципиальных технических трудностей, связанных с громоздкостью алгебраических вычислений, рассмотрим подробно относительно простой полилинейный гамильтониан, являющийся частным случаем (1.1):

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^{p} \omega_k a_k^+ a_k^- + B\left(a_1^+ \prod_{k=2}^{p} a_k^- + h.c.\right). \tag{2.1}$$

Заметим, что при построении главной асимптотики спектра из всей суммы в (1.1) следует оставить только один моном, старший по степеням операторов $a^{\pm}$, и (2.1) представляет частный случай такого монома.

Гамильтониан (2.1) имеет полный набор сохранения [4], т. е. является полностью интегрируемой по Лиувиллю динамической системой. Эти законы сохранения линейны по операторам числа частиц:

$$\begin{gathered}\hat{N} = \hat{n}_1 + \hat{n}_p; \quad \hat{I}_k = \hat{n}_k - \hat{n}_p,\\ k = 2, 3, \ldots, p-1.\end{gathered} \tag{2.2}$$

Законы сохранения $\hat{I}_k$ в (2.2) фиксируют разности между числами заполнения частиц указанных сортов, а закон сохранения $\hat{N}$ ограничивает их область изменения. Для сокращения вычислений удобно положить собственные значения операторов $\hat{I}_k$ равными нулю: $I_k = 0$. Влияние выбора этих постоянных на спектр гамильтониана при переходе к асимптотике $N \to +\infty$ имеет порядок $O(1/N)$, т. е. несущественно в главной части.

Итак, рассмотрим задачу на собственные значения $\hat{H}\psi = E\psi$ для гамильтониана (2.1), ограниченного на подпространство законов сохранения (2.2). Соответствующие величины будем снабжать индексом N. Собственная функция $|\psi_N\rangle$ представляется в виде разложения по фоковскому базису $|n\rangle = |n_1\rangle_1 \ldots |n_p\rangle_p$:

$$|\psi_N\rangle = \sum_{n_1,\ldots,n_p} u^{(N)}_{n_1\ldots n_p} |n_1\rangle_1 \ldots |n_p\rangle_p.$$

В силу выбранных законов сохранения $n_2 = n_3 = \cdots = n_p$, а $n_1 + n_p = N$. Следовательно, в p-компонентном коэффициенте $u^{(N)}_{n_1\ldots n_p}$ разложения $p-1$ компонент связаны законами сохранения, и потому независимым является только один параметр n_p, который на данном подпространстве может принимать любые целочисленные значения от 0 до N. В результате разложение $|\psi_N\rangle$ имеет вид

$$|\psi_N\rangle = \sum_{j=0}^{N} u_j^{(N)} |N-j\rangle_1 |j\rangle_2 \ldots |j\rangle_p. \tag{2.3}$$

Действуя на вектор (2.3) оператором (2.1) и используя правила (1.2), получаем из уравнения $\hat{H}|\psi_N\rangle = E^{(N)}|\psi_N\rangle$ систему для определения компонент собственной функции $\mathbf{u}^{(N)} = \left(u_0^{(N)}, u_1^{(N)}, \ldots, u_N^{(N)}\right)$:

$$\tilde{H}^{(N)}\mathbf{u}^{(N)} = x^{(N)}\mathbf{u}^{(N)}, \quad x^{(N)} = \frac{E^{(N)} - \omega_1 N}{B}, \tag{2.4}$$

где $\tilde{H}^{(N)}$ — симметричная трехдиагональная (якобиева) $(N+1)\times(N+1)$-матрица:

$$\begin{aligned}\tilde{H}^{(N)}_{k,j} &= \sqrt{\tilde{q}_{k+1,N}}\,\delta_{k,j+1} + \tilde{c}_{k,N}\delta_{k,j} + \\ &+ \sqrt{\tilde{q}_{k,N}}\,\delta_{k,j-1}, \quad k,j = 0,\ 1,\ \ldots,\ N,\end{aligned} \tag{2.5}$$

$$\begin{aligned}\tilde{q}_{k,N} &= k^{p-1}\left(N - k + 1\right),\\ \tilde{c}_{k,N} &= \frac{k}{B}\left(-\omega_1 + \sum_{i=2}^{p}\omega_i\right).\end{aligned} \tag{2.6}$$

Таким образом, задача на собственные значения для гамильтониана (2.1) сводится на инвариантном подпространстве к определению спектра якобиевой матрицы вида (2.5) с элементами (2.6).

III. Существование асимптотической функции распределения спектра

Найдем главную часть спектра гамильтониана (2.5) по N. С этой целью построим главную асимптотику $\sigma(x)$ точечной плотности спектра

$$\sigma_N(x) = \frac{1}{N+1}\sum_{j=0}^{N} \delta\left(x - x_j^{(N)}\right) \tag{3.1}$$

конечномерной задачи при $N \to +\infty$, где $x_j^{(N)}$ — собственные значения матрицы (2.5). Существование предельной функции $\sigma(x)$ устанавливается следующей теоремой.

Теорема 3.1. Пусть матрица гамильтониана на инвариантном подпространстве является якобиевой, а ее элементы определяются в (2.6). Тогда на отрезке $[-R, R]$, где $R = 2\sqrt{(p-1)^{p-1}/p^p}$, существует предельная плотность $\sigma(s)$ распределения нормированных собственных значений $s^{(N)} = x^{(N)}/(N+1)^{p/2}$, являющаяся слабым пределом последовательности $\sigma_N(s)$ (3.1) при $N \to +\infty$. □

Доказательство. Рассмотрим моменты плотности (3.1), т.е. средние значения степеней матрицы (2.5):

$$\tilde{\mu}_{n,N} = \int x^n \sigma_N(x)\, dx = \frac{1}{N+1} \operatorname{Tr}\left(\tilde{H}^{(N)}\right)^n. \quad (3.2)$$

В частности, сумма собственных значений равна

$$\tilde{\mu}_{1,N} = \frac{1}{N+1}\sum_{k=0}^{N} \tilde{c}_{k,N} = \frac{1}{N+1}\frac{\Omega}{B}\sum_{k=1}^{N} k = \frac{N\Omega}{2B}, \qquad \Omega = -\omega_1 + \sum_{i=2}^{p} \omega_i, \quad (3.3)$$

а сумма их квадратов равна

$$\tilde{\mu}_{2,N} = \frac{N^2\Omega^2}{3B^2}\left(1 + \frac{1}{2N}\right) + S_{p-1}(N) + S_{p-1}(N-1) - \frac{1}{N+1}\left(S_p(N) + S_p(N-1)\right). \quad (3.4)$$

В (3.4) использовано обозначение $S_p(N)$ для суммы p-х степеней натуральных чисел от 1 до N.

Поскольку порядок $S_p(N)$ равен $(N+1)^p$, то при $p > 2$ главная часть по N второго момента распределения (3.1) определяется побочной диагональю матрицы (2.5) и имеет порядок $(N+1)^p$. Введем нормированные собственные значения по формуле

$$s^{(N)} = x^{(N)}(N+1)^{-p/2}. \quad (3.5)$$

Моменты распределения величин $s^{(N)}$, в отличие от моментов (3.2), будем обозначать $\mu_{n,N}$ (без тильды): $\mu_{n,N} = \tilde{\mu}_{n,N}\,(N+1)^{-np/2}$.

Элементы главной диагонали матрицы $\left(\tilde{H}^{(N)}\right)^n$ представляют собой полиномы по k, порядок которых равен $1 + (n-1)p/2$ для нечетного n и $np/2$ для четного. Поэтому главная часть моментов нечетного порядка $\mu_{2n+1,N}$ имеет порядок $(N+1)^{1-p/2}$ и стремится к нулю с ростом N, поскольку $p > 2$. Главная часть моментов четного порядка $\mu_{2n,N}$ имеет порядок $O(1)$.

При фиксированном N матрица $\tilde{H}^{(N)}$ ограничена, поэтому существует предел

$$\tilde{R}_N = \overline{\lim_{n\to\infty}}\,(\tilde{\mu}_{n,N})^{1/n} = \lim_{n\to\infty}(\tilde{\mu}_{2n,N})^{1/(2n)},$$

являющийся спектральным радиусом оператора Гамильтона на данном инвариантном подпространстве. Спектральный радиус оператора с нормированными собственными значениями по формуле (3.5) есть

$$R_N = \lim_{n\to\infty}(\mu_{2n,N})^{1/(2n)} = \tilde{R}_N\,(N+1)^{-p/2}, \quad (3.6)$$

т.е. предел $\lim\limits_{n\to\infty}(\mu_{2n,N})^{1/(2n)}$ также существует. В силу полиномиальной зависимости от N моментов $\tilde{\mu}_{n,N}$, моменты $\mu_{n,N}$ представляют собой полиномы по степеням $1/(N+1)$, причем с положительными коэффициентами. Тогда последовательность $(\mu_{2n,N})^{(1/2n)}$ мажорируется сходящейся последовательностью $(\mu_{2n,0})^{(1/2n)}$ и потому сходится равномерно по N. В силу равномерной сходимости можно сначала найти предел

$$\mu_n = \lim_{N\to\infty}\mu_{n,N}, \quad (3.7)$$

а затем перейти к пределу $\lim\limits_{n\to\infty}(\mu_{2n})^{1/(2n)} = \lim\limits_{N\to\infty} R_N = R$.

Введем тогда в представлении матрицы (2.5) новую переменную $t \in [0;1]$, определяемую как $t = k/N$, и положим

$$q(t) = t^{p-1}(1-t). \quad (3.8)$$

Используя (3.8), находим, что предельные значения моментов (3.7) равны

$$\mu_{2n} = \binom{2n}{n}\int_0^1 q^n(t)\,dt = \frac{(2n)!\,((p-1)n)!}{n!\,(pn+1)!}, \quad \mu_{2n+1} = 0. \quad (3.9)$$

Из (3.6) и (3.9) находим спектральный радиус нормированного оператора:

$$R = \lim_{n\to\infty}(\mu_{2n})^{1/(2n)} = 2\sqrt{(p-1)^{p-1}/p^p}. \quad (3.10)$$

Итак, при $N \to \infty$ моменты нормированных собственных значений (3.5) существуют и конечны. Они являются моментами плотности распределения, к которой в слабом смысле сходится последовательность плотностей (3.1) нормированных собственных значений. Существование этого предельного распределения следует из теоремы Хелли [5], согласно которой у любой последовательности вероятностных мер существует хотя бы одна предельная точка. Обозначим ее $\sigma(s)$. Далее, в силу конечности спектрального радиуса (3.10), числовой ряд $\sum\limits_{n=0}^{\infty}(\mu_{2n})^{-1/(2n)}$ очевидно расходится, что означает выполнение условия теоремы Карлемана об однозначной восстановимости плотности меры $\sigma(s)$ по ее моментам. Таким образом, существует предельная плотность $\sigma(s)$, такая, что

$$\lim_{N\to\infty}\int_{-R_N}^{R_N}\sigma_N(s)s^n\,ds = \int_{-R}^{R}\sigma(s)s^n\,ds = \mu_n. \quad (3.11)$$

Теорема 1 доказана.

Напомним теперь [6], что с системой моментов (3.11) плотности меры $\sigma(s)$ связана система полиномов, ортогональных относительно этой меры на промежутке $(-R, R)$, причем каждые три последовательных полинома связаны рекуррентной зависимостью:

$$\begin{gathered} P_{k+1}(s) = sP_k(s) - g_k P_{k-1}(s), \\ P_{-1} = 0, \quad P_0 = 1, \end{gathered} \tag{3.12}$$

где последовательность g_k представляет собой отношение определителей матриц, составленных из моментов меры:

$$\begin{gathered} g_k = \frac{G_k G_{k-2}}{(G_{k-1})^2}, \\ G_k = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_k \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_{k+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mu_k & \mu_{k+1} & \cdots & \mu_{2k} \end{vmatrix}. \end{gathered} \tag{3.13}$$

Тем самым определены компоненты асимптотической собственной функции, отвечающей нормированному собственному значению s. В базисе из этих функций гамильтониан — в данном случае (2.1) — диагонален, на диагонали стоят его собственные значения. Соответствующее преобразование базиса влечет за собой и преобразование операторов рождения и уничтожения, в терминах которых гамильтониан диагонален. Это преобразование является каноническим (сохраняет коммутационные соотношения) только при $p \leqslant 2$.

IV. Асимптотика спектра укороченного гамильтониана

Аналогичные рассуждения могут быть проведены и в случае укороченного гамильтониана общего вида (1.1), когда в сумме оставлен самый старший по порядку взаимодействия моном. Предполагается, что такой моном единственный с точностью до *h.c.*, причем он обладает полным набором законов сохранения, линейных по операторам числа частиц. Достаточные условия для этого сформулированы в [7]: оператор $\hat{I} = \sum\limits_{k=1}^{p} C_k \hat{n}_k$ коммутирует с гамильтонианом (1.1), если вектор коэффициентов C ортогонален линейной оболочке векторов $\alpha - \beta$, составленных из показателей степеней операторов $a^{\pm}$: $(C, \alpha - \beta) = 0$. Если эта оболочка одномерна, то гамильтониан имеет $p - 1$ линейно независимых законов сохранения указанного вида. Для монома это имеет место, если вектор α содержит хотя бы одну нулевую компоненту, но в целом отличен от нулевого вектора.

Пусть для определенности вектор α имеет строго положительные компоненты $\alpha_1, \ldots, \alpha_s$ на s первых местах: $1 \leqslant s < p$, а остальные $p - s$ компоненты равны нулю. В силу наличия слагаемого *h.c.* вектор β, напротив, имеет первые s компонент нулевых, а остальные $p - s$ его компонент положительные.

Введем обозначения:

$$\alpha^\alpha = \prod_k \alpha_k^{\alpha_k}, \quad \beta^\beta = \prod_k \beta_k^{\beta_k}, \quad |\alpha| = \sum_k \alpha_k. \tag{4.1}$$

Аналогом нормировки (3.5) тогда является соотношение

$$s^{(N)} = x^{(N)} N^{-(|\alpha|+|\beta|)/2}, \tag{4.2}$$

а аналогом величины (3.8) – формула

$$q(t) = \frac{\alpha^\alpha \beta^\beta}{\alpha_s^{|\alpha|} \beta_p^{|\alpha|+|\beta|}} t^{|\beta|} (1 - \alpha_s t)^{|\alpha|}. \tag{4.3}$$

Спектр укороченного гамильтониана асимптотически расположен симметрично относительно нуля, моменты четного порядка имеют вид

$$\begin{gathered} \mu_{2n} = \lim_{N\to\infty} \mu_{2n,N} = \binom{2n}{n} \int\limits_0^{1/\alpha_s} q^n(t)\, dt = \\ = \binom{2n}{n} \left[\frac{\alpha^\alpha \beta^\beta}{(\alpha_s \beta_p)^{|\alpha|+|\beta|}}\right]^n \frac{\Gamma(|\alpha|n+1)\Gamma(|\beta|n+1)}{\Gamma(|\alpha|n + |\beta|n + 2)}, \end{gathered} \tag{4.4}$$

где Γ есть гамма-функция Эйлера. Спектральный радиус равен

$$\begin{gathered} R = \lim_{n\to\infty} (\mu_{2n})^{1/2N} = 2\sqrt{QZ}; \\ Q = \frac{\alpha^\alpha \beta^\beta}{(\alpha_s \beta_p)^{|\alpha|+|\beta|}}, \\ Z = \frac{|\alpha|^{|\alpha|} |\beta|^{|\beta|}}{(|\alpha| + |\beta|)^{|\alpha|+|\beta|}}. \end{gathered} \tag{4.5}$$

Используя (4.4) – (4.5), можно получить аналитическое выражение для характеристической функции предельной плотности распределения спектра:

$$\begin{gathered} \chi(z) = \int\limits_{-R}^{R} \sigma(s) \exp(isz)\, ds = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!} \mu_{2k} z^{2k} = \\ = \int\limits_0^{1/\alpha_s} J_0(z\sqrt{q(t)})\, dt, \end{gathered} \tag{4.6}$$

где $J_0(z)$ — функция Бесселя нулевого порядка, а $q(t)$ определена в (4.3). Для каждого набора мультииндексов α, β формула (4.6) определяет специальную функцию $\chi_{\alpha,\beta}(z)$, которая отвечает за асимптотику спектра соответствующей модели рассеяния.

Из хода доказательства теоремы 1 вытекает, что в главной асимптотике спектра не участвуют диагональные элементы матрицы (2.5), что связано с тем, что они имеют меньший порядок по N по сравнению с элементами побочной диагонали. Поэтому главную диагональ матрицы гамильтониана в представлении (2.5) можно считать асимптотически нулевой. Отметим, что диагональные элементы могут быть и точно равны нулю: это возможно, когда параметр Ω, введенный в (3.3), равен нулю. В общем случае (1.1) величина Ω определяется равенством

$$\Omega = (\beta - \alpha, \omega) / \beta_p. \tag{4.7}$$

В квантовой оптике случай $\Omega = 0$ называется «точным резонансом». В этом случае вектор частот пропорционален какой-либо линейной комбинации законов сохранения. Таким образом, рассмотрение гамильтониана комбинационного рассеяния при больших числах заполнения показывает, что в асимптотике реализуется случай точного резонанса.

Соотношения (3.12), (3.13) и (4.5), (4.6) составляют основу метода нахождения асимптотики спектра полиномиальных квантовых гамильтонианов, укорочение которых имеет полный набор законов сохранения.

Литература

1. *Perina Ja.* Quantum Statistics of Nonlinear Optics. – Dordrecht: Reidel, 1984.

2. *Mandel L., Wolf E.* Optical Coherence and Quantum Optics. – Cambridge: Cambridge University Press, 1995.

3. *Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н.* (*мл.*). Введение в кантовую статистическую механику. – М.: Наука, 1984.

4. *Orlov Yu.N., Vedenyapin V.V.* Special polynomials in problems of quantum optics // Modern Phys. Lett. B. – 1995. – V. 9. – P. 291–298.

5. *Феллер В.* Введение в теорию вероятностей и ее приложения. – М.: Мир, 1964.

6. *Бейтмен А., Эрдейи Т.* Высшие трансцендентные функции. Т. 2. – М.: Наука, 1974.

7. *Веденяпин В.В., Орлов Ю.Н.* О законах сохранения для полиномиальных квантовых гамильтонианов и для дискретных моделей уравнения Больцмана // ТМФ. – 1999. – Т. 121. – С. 307–315.

Поступила в редакцию 14.01.2011