Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

П. В. Елютин, О. В. Смирнова, О квазиклассическом пределе квадратичной восприимчивости, *ТМФ*, 1999, том 119, номер 1, 93–104

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf730>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.89.197.203

26 апреля 2023 г., 12:47:12

© 1999 г.

П. В. Елютин*, О. В. Смирнова†

О КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ПРЕДЕЛЕ КВАДРАТИЧНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ

Рассматривается квазиклассический предел $\hbar \rightarrow 0$ квадратичной восприимчивости автономных гамильтоновых систем к гармонически зависящему от времени внешнему полю. Для вычисления этого предела предложен основанный на соотношениях симметрии и правилах сумм метод $\hbar$ -разложений матричных элементов координаты и квантовых частот перехода, реализованный до членов порядка $\hbar^2$ включительно. Квазиклассический предел квадратичной восприимчивости выражен через классические характеристики движения и пригоден для определения отклика хаотических систем.

1. ВВЕДЕНИЕ

Принцип соответствия в квантовой теории обычно понимается как утверждение об асимптотической эквивалентности результатов квантового и классического расчетов в квазиклассическом пределе $\hbar \rightarrow 0$ [1–3]. В стандартной квантовой теории принято правило Дирака для построения квантовых моделей по заданным классическим. Оно состоит в замене канонических динамических переменных p_i, q_j операторами $\hat{p}_i, \hat{q}_j$ с предписанными коммутационными соотношениями $[\hat{p}_i, \hat{q}_j] = -i\hbar\delta_{ij}$. Поэтому принцип соответствия в его традиционной форме является не самостоятельной аксиомой, а всего лишь эвристическим принципом – источником теорем, которые должны доказываться на основе аппарата квантовой теории.

Наибольшую роль играют теоремы, устанавливающие асимптотическое равенство частоты перехода ω_{kn} между стационарными состояниями $|k\rangle$ и $|n\rangle$ ($k > n$) в квазиклассическом пределе $(k-n)$ -кратной частоте классического движения Ω и асимптотическое равенство матричного элемента координаты x_{kn} амплитуде $(k-n)$ -й гармоники в фурье-разложении закона движения классической системы X_{k-n} [4, гл. 3]. Этим теорем достаточно для установления вида квазиклассического предела многих физических величин. Особый случай представляют те из этих величин, которые в квантовой теории

*Московский государственный университет, Москва, Россия

†Московский государственный университет, Москва, Россия.

E-mail: Smirnova@astral.ilc.msu.su

выражаются формулами вида $\hbar^{-m} F(\omega_{kn}, x_{kn})$, где m — целое. Для таких величин квазиклассический предел определяется не главными (нулевого порядка по $\hbar$) членами в асимптотических разложения ω_{kn} и x_{kn} , а поправками высших порядков по $\hbar$.

Примерами таких величин являются восприимчивости, определяющие величину отклика системы на приложенное к ней поле, меняющееся со временем по гармоническому закону. Если $\hat{H} = \hat{H}_0 - \hat{x}F \cos \omega t$, то квантовое выражение для восприимчивости m -го порядка, пропорциональной фурье-амплитуде усредненного закона движения системы $\langle \hat{x}(t) \rangle$ на частоте $m\omega$, имеет вид $\hbar^{-m} F(\omega_{kn}, x_{kn})$ [5, с. 56].

Для вычисления квазиклассического предела линейной восприимчивости [6, с. 440]

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_k \frac{2x_{kn}^2 \omega_{kn}}{\omega_{kn}^2 - \omega^2} \quad (1.1)$$

достаточно использовать простое интерполяционное правило

$$x_{kn} \approx X_{k-n}(E_c), \quad (1.2a)$$

$$\omega_{kn} \approx (k-n)\Omega(E_c), \quad (1.2b)$$

где интерполяционная энергия E_c — среднее арифметическое между энергиями состояний $|n\rangle$ и $|k\rangle$:

$$E_c = \frac{E_n + E_k}{2}. \quad (1.3)$$

Правило (1.2), (1.3) применяется обычно без обоснований или ссылок на источники [7, 8]. В результате квазиклассического предельного перехода выражение (1.1) переходит в выражение

$$\alpha(\omega) = \Omega \sum_{s=1}^{\infty} \frac{d}{dE} \left(\frac{s^2 X_s^2 \Omega}{s^2 \Omega^2 - \omega^2} \right), \quad (1.4)$$

выведенное в рамках классической теории в работе [7].

Квадратичная восприимчивость (на удвоенной частоте) $\beta(\omega)$ дается выражением [9]

$$\beta(\omega) = \frac{3}{2\hbar^2} \sum_{m,k} x_{nm} x_{mk} x_{kn} \frac{\omega_{mn} \omega_{kn}^3 + \omega^2 \omega_{kn}^2 - 2\omega^2 \omega_{mn} \omega_{kn}}{(\omega_{mn}^2 - \omega^2)(\omega_{kn}^2 - \omega^2)(\omega_{kn}^2 - 4\omega^2)}. \quad (1.5)$$

Квазиклассический предел этого выражения определяется членами порядков $\hbar^1$ и $\hbar^2$ в $\hbar$ -разложениях матричных элементов и частот переходов. Точности приближения (1.2), (1.3) при этом недостаточно.

Целью данной работы является исследование квазиклассического предела выражения (1.5) — квадратичной восприимчивости на удвоенной частоте квантовой системы с дискретным спектром. Этой работой мы хотим привлечь внимание специалистов по квазиклассическим методам к проблеме вычисления $\hbar$ -разложений матричных элементов координаты, имеющей методическое и практическое значения. В качестве первого шага к решению данной проблемы мы предлагаем метод, использующий некоторые предположения общего характера, которые, вообще говоря, требуют дополнительного обоснования.

2. ТЕОРЕМЫ СООТВЕТСТВИЯ ДЛЯ ЧАСТОТ И МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ОСТАТОЧНЫМ ЧЛЕНОМ $O(\hbar^4)$

В настоящее время теоремы соответствия для частот ω_{kn} и для матричных элементов x_{kn} имеют существенно разный статус.

Теорема соответствия для частот в нулевом порядке по $\hbar$ с остаточным членом $O(\hbar)$ доказана Масловым и Федорюком [10] для некоторого класса потенциалов. Этими же авторами развита техника вычисления высших поправок к правилу квантования Бора–Зоммерфельда, которая позволяет систематически получить $\hbar$ -разложение для частот [11, 12]. В дальнейшем мы ссылаемся на нее как на пост-ВКБ-технику.

Теорема соответствия для матричных элементов опирается на традицию и примеры. В книге [13, § 48] она просто постулируется. Приведенное в книге [4] обоснование теоремы, опирающееся на метод ВКБ, содержит приближения с неконтролируемой точностью. В работе [14] намечена схема доказательства теоремы соответствия в форме (1.2а), (1.3) для произвольного оператора с остаточным членом $O(\hbar^2)$, основанная на комбинации принципа соответствия Вейля [15, с. 315] и ВКБ-техники. Математически строгое доказательство теоремы соответствия для матричных элементов даже в нулевом порядке по $\hbar$ авторам неизвестно.

Ниже для установления вида $\hbar$ -разложения матричных элементов координаты мы используем соотношения симметрии и правила сумм. Предельный переход $\hbar/S \rightarrow 0$, где масштаб действия S может быть составлен из характерных параметров системы $S = \sqrt{\mu U_0} a$, выполняется при фиксированной энергии уровня n , $E_n \equiv E = \text{const}$. Рассмотрим одночастичную систему с гамильтонианом

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + U(x). \quad (2.1)$$

Учитывая теорему соответствия нулевого порядка, можно выразить квантовую частоту перехода с помощью следующего $\hbar$ -разложения:

$$\omega_{n+s,n} = s\Omega(E) + \hbar s^2 A_1 + \hbar^2 (s^3 A_2 + s A_3) + \hbar^3 (s^4 A_4 + s^2 A_5), \quad (2.2)$$

где $\Omega(E)$ – частота классического движения, $A_1, \dots, A_5$ – некоторые функции энергии. Здесь и далее, если не сказано иное, аргументом всех функций является энергия $E_n \equiv E$.

Покажем, что часть коэффициентов в разложении (2.2) может быть определена из следующих очевидных соотношений симметрии и транзитивности для частот:

$$\omega_{n+s,n} = -\omega_{n,n+s}, \quad (2.3)$$

$$\omega_{n+s,n} + \omega_{n+s+q,n+s} = \omega_{n+s+q,n}. \quad (2.4)$$

В квазиклассической области соотношения (2.3) и (2.4) можно переписать в виде

$$\omega_{n+s,n}(E) = -\omega_{n,n+s}(E + \hbar\omega_{n+s,n}), \quad (2.5)$$

$$\omega_{n+s,n}(E) + \omega_{n+s+q,n+s}(E + \hbar\omega_{n+s,n}) = \omega_{n+s+q,n}(E). \quad (2.6)$$

Раскладывая правую часть формулы (2.5) и второй член в левой части формулы (2.6) по степеням $\hbar$ и приравнивая члены при одинаковых степенях, получаем следующие равенства:

$$A_1 = \frac{1}{2}\Omega\Omega', \quad A_2 = \frac{1}{6}(\Omega\Omega')'\Omega, \quad (2.7)$$

$$A_4 = \frac{1}{24}((\Omega\Omega')'\Omega)'\Omega, \quad A_5 = \frac{1}{2}(A_3\Omega)', \quad (2.8)$$

здесь и далее штрих означает дифференцирование по энергии $E_n \equiv E$.

Коэффициент A_3 не может быть определен из общих требований (2.3), (2.4), т.к. разложение (2.2) содержит только одну характеристику движения – частоту $\Omega(E)$. Для модели типа (2.1) зависимость $\Omega(E)$ не определяет однозначно вид потенциала $U(x)$ [16, § 13], а, следовательно, и вид связанного с ним квантового спектра. Поэтому для вычисления коэффициента A_3 необходима дополнительная информация, которую дает пост-ВКБ-правило квантования [11]

$$\oint p dx = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) - 2\pi\hbar^2\delta(E) + O(\hbar^4), \quad (2.9)$$

$$\delta(E) = -\frac{1}{24}\frac{d}{dE}\langle U_{xx} \rangle, \quad (2.10)$$

здесь угловые скобки $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по периоду. На основе этих формул получается, что

$$A_3 = -\delta'\Omega^2. \quad (2.11)$$

Итак, $\hbar$ -разложение частот имеет вид

$$\begin{aligned} \omega_{n+s,n} = s\Omega + \hbar s^2 \frac{\Omega\Omega'}{2} + \hbar^2 \left(s^3 \frac{(\Omega\Omega')'\Omega}{6} - s\delta'\Omega^2 \right) + \\ + \hbar^3 \left(\frac{s^4}{24} ((\Omega\Omega')'\Omega)'\Omega - \frac{s^2}{2} (\delta'\Omega^3)' \right) + O(\hbar^4). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Соответствующее $\hbar$ -разложение для частот можно также записать в компактной форме

$$\omega_{n+s,n} = s\Omega(E_c) \left(1 + \hbar^2 \left(s^2 \frac{(\Omega\Omega')'}{6} - \delta'\Omega \right) \right) + O(\hbar^4). \quad (2.13)$$

Здесь аргументом всех функций является энергия E_c .

При определении вида $\hbar$ -разложения матричных элементов координаты мы будем опираться на следующее основное предположение. Допустим, что существует единое для всех моделей типа (2.1) $\hbar$ -разложение матричных элементов координаты, которое в нулевом порядке по $\hbar$ дает общепринятую теорему соответствия $x_{kn} = X_{k-n}(\overline{E}) +$

$O(\hbar)$, $E_n \leq \overline{E} \leq E_k$. Учитывая инвариантность уравнения Шредингера при одновременной замене $\hbar \rightarrow -\hbar$, $t \rightarrow -t$, определим общий вид $\hbar$ -разложения матричных элементов следующим образом:

$$x_{n+s,n} = X_s + \hbar s a_1 + \hbar^2 (s^2 a_2 + a_3) + \hbar^3 (s^3 a_4 + s a_5). \quad (2.14)$$

Здесь $a_1, \dots, a_5$ — некоторые функции величин $E_n \equiv E$ и X_s . Вид этих функций будет определен ниже.

Матричные элементы должны удовлетворять соотношениям симметрии $x_{n+s,n} = x_{n,n+s}$, которые в квазиклассической области имеют вид

$$x_{n+s,n}(E) = x_{n,n+s}(E + \hbar \omega_{n+s,n}). \quad (2.15)$$

Используя $\hbar$ -разложение частот (2.12), раскладывая правую часть формулы (2.15) по степеням $\hbar$ и приравнявая члены при одинаковых степенях, получим следующие соотношения:

$$a_1 = \frac{1}{2} X'_s \Omega, \quad (2.16)$$

$$a_4 = \frac{1}{12} X'_s (\Omega \Omega')' \Omega + \frac{1}{12} X_s''' \Omega^3 + \frac{1}{4} X_s'' \Omega^2 \Omega' + \frac{1}{4} a_1' \Omega' \Omega - \frac{1}{4} a_1'' \Omega^2 + \frac{1}{2} a_2' \Omega, \quad (2.17)$$

$$a_5 = \frac{1}{2} X'_s A_3 + \frac{1}{2} a_3' \Omega. \quad (2.18)$$

Соотношения (2.16)–(2.18), правило сумм Томаса–Райхе–Куна [17, с. 409]

$$\sum_k x_{nk}^2 \omega_{nk} = \frac{\hbar}{2} \quad (2.19)$$

и $\hbar$ -разложение частоты (2.12) позволяют получить первое правило сумм для поправок a_2 и a_3 :

$$\sum_s s^2 \left\{ Y' + \frac{\Omega'}{\Omega} Y \right\} = \sum_s s^2 (G + F), \quad (2.20)$$

где

$$\begin{aligned} Y &\equiv X_s (a_3 + s^2 a_2), \\ G &\equiv -\frac{(X_s^2 \delta' \Omega^3)'}{\Omega^2} + \frac{1}{2} \frac{X_s^2 (\delta' \Omega^3)'}{\Omega^2}, \\ F &\equiv s^2 \left[\frac{1}{2} X_s X_s''' \Omega^3 + \frac{1}{4} X_s X_s'' \Omega^2 \Omega' - \frac{1}{12} X_s X'_s (\Omega \Omega')' \Omega + \right. \\ &\quad \left. + X_s^2 \left(\frac{1}{3} \Omega' \Omega'' \Omega + \frac{5}{24} \Omega'^3 + \frac{1}{24} \Omega''' \Omega^2 \right) - \frac{1}{8} X_s'^2 \Omega \Omega' \right]. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Рассмотрим следующее правило сумм [18, гл. 13]:

$$\sum_k x_{nk}^2 \omega_{nk}^3 = \frac{\hbar}{2} (U_{xx})_{nn}. \quad (2.22)$$

Квазиклассическое разложение $(U_{xx})_{nn}$ имеет вид

$$(U_{xx})_{nn} = \langle U_{xx} \rangle + O(\hbar^2). \quad (2.23)$$

Наличие поправки порядка $\hbar$ к $\langle U_{xx} \rangle$ не совместимо с правилом сумм (2.22) (по-видимому, для любого оператора $\hat{A}$ $A_{nn} = \langle A \rangle + O(\hbar^2)$). Поскольку вид поправок второго порядка по $\hbar$ к среднему $\langle U_{xx} \rangle$ неизвестен, правило (2.22) в общем виде не может быть использовано для построения правила сумм для поправок a_2 и a_3 . Эту трудность можно обойти, используя в соотношении (2.22) специальный потенциал вида

$$U(x) = \frac{ax^2}{2} + \frac{bx^3}{6},$$

здесь a и b – произвольные коэффициенты. При этом дальнейшие вычисления не теряют общности, коль скоро мы предполагаем, что существует единое для всех моделей типа (2.1) $\hbar$ -разложение матричных элементов координаты. Тогда

$$(U_{xx})_{nn} = a + bx_{nn} = a + b(X_0 + \hbar^2 a_3(s=0)),$$

и формула (2.22) принимает вид

$$2 \sum_k x_{nk}^2 \omega_{nk}^3 = a\hbar + b\hbar X_0 + b\hbar^3 a_3(s=0). \quad (2.24)$$

Подставляя в правую часть (2.24) $\hbar$ -разложение частоты (2.12) и $\hbar$ -разложение матричных элементов (2.14) и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях $\hbar$, в первом порядке по $\hbar$ получим соотношение

$$\left(V' + 3 \frac{\Omega'}{\Omega} V \right) \Omega^4 = a + bX_0, \quad (2.25)$$

где

$$V = \sum_s s^4 X_s^2,$$

а в третьем порядке по $\hbar$ получим второе правило сумм для поправок a_2 и a_3 :

$$\sum_s s^4 \Omega \{Y \Omega^3\}' = \sum_s s^4 (\tilde{G} + \tilde{F}) + ba_3(s=0), \quad (2.26)$$

здесь

$$\begin{aligned}\tilde{G} &\equiv -\frac{1}{2}\delta'\Omega^5(X_s^2)' - \frac{3}{2}(\delta'\Omega^5 X_s^{2'})', \\ \tilde{F} &\equiv s^2 \left\{ \frac{3}{2}(A_2\Omega^3 X_s^2)' + \frac{5}{8}(X_s'^2 + X_s X_s'')\Omega^5\Omega' + \right. \\ &\quad + \frac{X_s^{2'}}{4} \left(\frac{9}{2}\Omega'^2\Omega^4 + 3\Omega''\Omega^5 \right) + \frac{1}{24}X_s X_s''' \Omega^6 + \frac{1}{8}X_s' X_s'' \Omega^6 + \\ &\quad \left. + X_s^2 \left(\frac{1}{8}\Omega^5\Omega''' + \frac{5}{8}\Omega^4\Omega'\Omega'' - \frac{1}{4}\Omega^3\Omega'^3 - \frac{1}{8}\Omega^4\Omega'^2 \right) \right\},\end{aligned}$$

выражение для Y задано формулой (2.21).

Для того чтобы продвинуться дальше в определении коэффициентов a_2 и a_3 , необходимо факторизовать зависимость этих коэффициентов от X_s .

Будем искать решение уравнений (2.20), (2.26) в следующем виде:

$$a_3(E) = X_s(f\Omega - \delta\Omega'), \quad (2.27)$$

$$a_2(E) = \frac{1}{4}X_s'\Omega\Omega' + \frac{1}{8}X_s''\Omega^2 + \frac{1}{4}X_s\Omega\Omega'' + X_s g. \quad (2.28)$$

Тогда разложение матричного элемента $x_{n+s,n}$ можно записать следующим образом:

$$x_{n+s,n} = X_s(E_c) \left(1 + \hbar^2 \left(f\Omega - \delta\Omega' + \frac{s^2}{4}\Omega''\Omega + s^2 g \right) \right) + O(\hbar^4). \quad (2.29)$$

Здесь аргументом всех функций является энергия E_c . Структура выражений (2.27), (2.28) подобрана так, чтобы зависимость матричного элемента от X_s в формуле (2.29) факторизовалась и не содержала производных X_s по энергии. Подставляя (2.27), (2.28) в (2.20) и (2.26), получим, что функции $f(E)$, $g(E)$ являются решениями задачи Коши для системы линейных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned}\tilde{f}'(1 - V_1 V_2) &= R - R_1 V_1 + \tilde{f}(\tilde{X}_0 V_1 + V_1 V_2') - \tilde{g}\left(\frac{\Omega'}{\Omega} V_1\right), \\ \tilde{g}'(1 - V_1 V_2) &= R_1 - R V_2 + \tilde{f}\frac{\langle U_{xxx} \rangle}{\Omega} \tilde{X}_0 + \tilde{g}\left(V_1' V_2 + \frac{\Omega'}{\Omega} V_1 V_2\right)\end{aligned} \quad (2.30)$$

с начальными условиями $\tilde{f}(0) = 0$, $\tilde{g}(0) = 0$. Здесь

$$\begin{aligned}\tilde{f} &= 2f\langle T \rangle, & \tilde{g} &= g\frac{W}{\Omega^3}, \\ \tilde{X}_0 &= \frac{X_0}{2\langle T \rangle}, & W &= \sum_s s^6 X_s^2, \\ V_1 &= \frac{\Omega^3}{W} V, & V_2 &= \frac{V}{2\langle T \rangle}\end{aligned} \quad (2.31)$$

(для V и X_0 см. также (2.25)), $\langle T \rangle$ – средняя кинетическая энергия,

$$\begin{aligned}
 R = & -\frac{\delta'}{\Omega} - \frac{\delta\Omega'}{4\Omega^2} + \frac{\langle T \rangle}{\Omega} \left(\frac{\delta'\Omega'}{\Omega} - \frac{\delta\Omega'^2}{2\Omega^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{\delta\Omega'}{\Omega} \right)' - 3\delta'' \right) - \\
 & - \frac{1}{48\Omega} (V\Omega^3)''' + V' \left(\frac{13}{48}\Omega\Omega'' + \frac{1}{12}\Omega'^2 \right) + \\
 & + V \left(\frac{5}{2}\Omega'\Omega'' + 4\frac{\Omega'^3}{\Omega} - \frac{5}{4}\Omega\Omega''' \right), \\
 R_1 = & W' \left(\frac{9}{4}\Omega'^2\Omega^4 + \frac{3}{2}\Omega^5\Omega'' \right) - \frac{1}{48\Omega} (\Omega^3(\Omega^3W)')'' - \\
 & - fX_0 - \frac{3}{2}(\Omega^5\Omega'W)' + \frac{3}{2\Omega}(\delta'\Omega^5V)' - \delta'\Omega^4V' - \\
 & - \frac{W}{\Omega} \left(\frac{1}{16}\Omega^5\Omega''' - \frac{15}{16}\Omega^4\Omega'\Omega'' - \frac{3}{2}\Omega^3\Omega'^3 - \frac{1}{8}\Omega^4\Omega'^2 \right).
 \end{aligned}$$

Решение системы уравнений (2.30) существует и единственно.

Для модели гармонического осциллятора получим $f(E) = 0$, $g(E) = 0$ и разложение (2.29) воспроизводит известный результат $x_{n\pm 1, n} = X_1(E_c)$.

Итак, $\hbar$ -разложение матричных элементов имеет вид

$$\begin{aligned}
 x_{n+s, n} = & X_s + \hbar \frac{s}{2} X'_s \Omega + \hbar^2 \left(s^2 g X_s + \frac{s^2}{4} X_s \Omega \Omega'' + \right. \\
 & \left. + \frac{s^2}{4} X'_s \Omega \Omega' + \frac{s^2}{8} X''_s \Omega^2 + f \Omega X_s - \delta \Omega' X_s \right). \quad (2.32)
 \end{aligned}$$

В выражении (2.32) аргументом всех функций является энергия $E_n \equiv E$. Функции $f(E)$, $g(E)$ – это решения системы (2.30) (см. (2.31)). Коэффициенты a_4 и a_5 могут быть получены из соотношений (2.17), (2.18) с помощью формул (2.27), (2.28).

3. ТЕОРЕМА СООТВЕТСТВИЯ ДЛЯ КВАДРАТИЧНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ

Подставляя в выражение (1.5) $\hbar$ -разложения частот и матричных элементов, взятые в самом общем виде (2.2), (2.14), и отделяя в полученной конструкции члены порядка $\hbar^0$, определим квазиклассический предел квадратичной восприимчивости. Не пользуясь никакой информацией относительно коэффициентов $A_1, \dots, A_3$, $a_1, \dots, a_3$, кроме содержащейся в формулах (2.2), (2.14), и используя технику высокочастотных (по степеням ω^{-2}) разложений [19], мы можем показать, что поправки второго порядка по $\hbar$ в $\hbar$ -разложениях частот и матричных элементов (A_2, A_3, a_2, a_3) не вносят вклада в квазиклассический предел квадратичной восприимчивости. Действительно, раскладывая квазиклассический предел по степеням ω^{-2} , получим, что члены высокочастотного разложения, содержащие поправки второго порядка по $\hbar$ в разложении частот и матричных элементов, исчезают из-за антисимметрии по индексам суммирования.

Итак, вследствие особой симметрии выражения для квадратичной восприимчивости (1.5) члены второго порядка по $\hbar$ в $\hbar$ -разложениях частот перехода и матричных элементов координаты не вносят вклада в квазиклассический предел квадратичной восприимчивости, который, таким образом, имеет вид

$$\beta(\omega) = \sum_{s,q} \Omega \frac{d}{dE} \left(\Omega \left\{ \frac{sq X_{-s} X_q X'_{s-q}}{(q\Omega + 2\omega)(s\Omega + \omega)} - \frac{(s-q)s X_{-s} X'_q X_{s-q}}{(q\Omega + 2\omega)(s\Omega + \omega)} + \frac{(s-q)sq\Omega' X_{-s} X_q X_{s-q}}{(q\Omega + 2\omega)^2 (s\Omega + \omega)} \right\} \right). \quad (3.1)$$

Заметим, что при $\omega = 0$ выражение (3.1) можно привести к следующему виду:

$$\beta(0) = \frac{1}{2} \sum_{s,q} \Omega \frac{d^2}{dE^2} (\Omega^{-1} X_{-s} X_q X_{s-q}).$$

4. ВОСПРИИМЧИВОСТИ ХАОТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Согласно логике разделов 2, 3 квазиклассический предел квадратичной восприимчивости (3.1) получен именно для одномерных систем. Как известно, движение автономной гамильтоновой системы с двумя и более степенями свободы в общем случае не интегрируемо. При некоторых начальных условиях оно хаотично, т.е. обладает экспоненциальной неустойчивостью и непрерывным частотным спектром мощности [20].

В этом разделе квазиклассический предел квадратичной восприимчивости (3.1) обобщается на случай хаотических систем. Такое обобщение может быть достигнуто с помощью континуализации – замены суммирования по дискретным частотам интегрированием по частотному спектру. Выполним эту процедуру для линейной восприимчивости.

Выражение (1.4) может быть переписано в виде

$$\alpha(\omega) = \Omega \frac{d}{dE} \left(\frac{1}{\Omega} \int_{-\infty}^{\infty} S_x(\xi, E) \frac{\xi^2}{\xi^2 - \omega^2} d\xi \right), \quad (4.1)$$

где $S_x(\xi, E)$ – спектр мощности координаты на частоте ξ , связанный с автокорреляционной функцией

$$B_x(\tau, E) = \langle x(t)x(t+\tau) \rangle_t$$

соотношением

$$B_x(\tau, E) = \int_{-\infty}^{\infty} S_x(\xi, E) e^{-i\xi\tau} d\xi.$$

С другой стороны, полученное в работе [17] выражение для линейной восприимчивости хаотической системы имеет вид

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{\rho} \frac{d}{dE} \left(\rho \int_{-\infty}^{\infty} S_x(\xi, E) \frac{\xi^2}{\xi^2 - \omega^2} d\xi \right), \quad (4.2)$$

где $\rho(E)$ – объем энергетической поверхности. Учитывая, что для регулярной системы с одной степенью свободы $\rho(E) = \Omega(E)^{-1}$, и сопоставляя соотношения (4.1) и (4.2), заметим, что выражение (4.2) применимо как для регулярных, так и для хаотических систем. Далее, предложенный в работе [21] вывод классического выражения для линейной восприимчивости хаотических систем (4.2) не требует предположений о числе степеней свободы системы. Это связано с тем, что квантово-механические выражения для восприимчивостей [5, с. 56], правила сумм [18, гл. 13] и процедура континуализации [22, 23] не зависят от числа степеней свободы системы. На этом основании можно заключить, что выражение для континуализированной восприимчивости динамических систем не зависит ни от их размерности, ни от характера движения. Обобщение выражения для восприимчивости одномерной системы на хаотический случай достигается заменой $\rho(E) = \Omega(E)^{-1}$.

Перейдем в выражении (3.1) от суммирования к интегрированию по частотам. Для этого заметим, что комбинации трех фурье-амплитуд резонансных знаменателей могут быть выражены через трехточечную корреляционную функцию следующего вида:

$$\begin{aligned} C_{xE}(\tau, \theta) &\equiv \langle x_E(t) \dot{x}(t + \tau) \dot{x}(t + \theta) - \dot{x}(t) \dot{x}(t + \tau) x_E(t + \theta) \rangle_t = \\ &= - \sum_{s, q} i s(s - q) q \Omega^2 \Omega' X_{-s} X_q X_{s-q} e^{iq\Omega\theta} e^{-is\Omega\tau} + \\ &\quad + \sum_{s, q} (sq X_{-s} X_q X'_{s-q} - s(s - q) X_{-s} X'_q X_{s-q}) \Omega^2 e^{iq\Omega\theta} e^{-is\Omega\tau}. \end{aligned}$$

Угловые скобки $\langle \dots \rangle_t$ означают усреднение по времени. Тогда

$$\beta(\omega) = -\Omega \frac{d}{dE} \left(\frac{1}{\Omega} \int_{-\infty}^0 \int_0^{\infty} C_{xE}(\tau, \theta) e^{-i\omega\tau} e^{i2\omega\theta} d\tau d\theta \right).$$

Таким образом, вводя функции

$$\begin{aligned} T_{xE}(\xi, \eta) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} C_{xE}(\tau, \theta) e^{i(\xi\tau + \eta\theta)} d\tau d\theta, \\ C_x(\tau, \theta) &= \langle x(t) x(t + \tau) x(t + \theta) \rangle_t, \end{aligned}$$

получим для квадратичной восприимчивости выражение, эквивалентное формуле (3.1),

$$\beta(\omega) = \iint_{-\infty}^{+\infty} d\xi d\eta \left\{ \frac{1}{\rho} \left[\rho \frac{1}{(\omega + \xi)(2\omega - \eta)} T_{xE}(\xi, \eta) \right]' \right\}, \quad (4.3)$$

величины x_E и y_E определяются как решения системы уравнений

$$\begin{aligned} \ddot{x}_E &= -U_{xx}x_E - U_{xy}y_E, \\ \ddot{y}_E &= -U_{yx}x_E - U_{yy}y_E \end{aligned}$$

с начальными условиями

$$\begin{aligned} x_E|_{t=0} &= \frac{\partial x_0}{\partial E}, & \dot{x}_E|_{t=0} &= \frac{\partial \dot{x}_0}{\partial E}, \\ y_E|_{t=0} &= \frac{\partial y_0}{\partial E}, & \dot{y}_E|_{t=0} &= \frac{\partial \dot{y}_0}{\partial E}. \end{aligned}$$

В частности,

$$\beta(0) = \frac{1}{2\rho} \frac{d^2}{dE^2} [\rho C_x(0, 0)].$$

Таким образом, квазиклассический предел квадратичной восприимчивости выражен через трехточечные корреляционные функции, объем энергетической поверхности и их производные по энергии. Полученное выражение может быть использовано для численного расчета квадратичной восприимчивости. Практически такой подход более удобен, чем прямая “симуляция” отклика в численном эксперименте, предъявляющая высокие требования к численной процедуре и компьютерным ресурсам.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для вычисления квазиклассического предела ($\hbar \rightarrow 0$) квадратичной восприимчивости предложен метод $\hbar$ -разложений матричных элементов и частот перехода, основанный на соотношениях симметрии и правилах сумм. Метод позволяет определить $\hbar$ -разложения этих величин с точностью до $\hbar^3$ включительно. В рамках предложенного метода авторам не удалось выявить соотношения, позволяющие связать рекуррентным образом коэффициенты разложений при различных степенях $\hbar$. Поэтому особый интерес представляет дальнейшее изучение следующих вопросов:

- 1) получение $\hbar$ -разложений матричных элементов на основе техники Маслова [24];
- 2) исследование вклада в квазиклассический предел нелинейной восприимчивости k -го порядка высших поправок в $\hbar$ -разложениях x_{nm} и ω_{nm} ;
- 3) получение квазиклассических поправок к классическому пределу восприимчивости k -го порядка. Здесь необходимо отметить, что квазиклассическое разложение восприимчивостей имеет вид

$$\sum_{n=0}^{\infty} C_n \hbar^{2n}.$$

Благодарности. Авторы выражают благодарность Е. А. Островской за полезное обсуждение постановки задачи, а также В. П. Крайнову, Ш. Мукамелю (Sh. Mukamel) и М. В. Федорову за обсуждение результатов работы и полезные замечания. Авторы с благодарностью отмечают поддержку данной работы грантом Поддержки ведущих научных школ № 96-15-96476.

Список литературы

- [1] Физический энциклопедический словарь. Т. 4. Гл. ред. Б. А. Введенский, Б. М. Вул. М.: Сов. энциклопедия, 1965.
- [2] Квантовая механика. Терминология (Сборники рекомендуемых терминов. Вып. 104). Отв. ред. Н. П. Клепиков. М.: Наука, 1985.
- [3] Физическая энциклопедия. Т. 4. Гл. ред. А. М. Прохоров. М.: Научн. изд-во "Большая Российская энциклопедия", 1994. С. 599.
- [4] А. Б. Мигдал. Качественные методы в квантовой теории. М.: Наука, 1975.
- [5] Д. Н. Клышко. Физические основы квантовой электроники. М.: Наука, 1986.
- [6] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика. Часть 1. Изд. 4-е. М.: Наука, 1995.
- [7] А. В. Гапонов, М. И. Петелин, В. К. Юлпатов. Изв. вузов. Радиофизика. 1967. Т. X. № 9–10. С. 1414.
- [8] Э. С. Медведев. ТМФ. 1992. Т. 90. № 2. С. 218.
- [9] Н. Бломберген. Нелинейная оптика. М.: Мир, 1965.
- [10] В. П. Маслов, М. В. Федорюк. Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики. М.: Наука, 1976.
- [11] В. П. Маслов. УМН. 1960. Т. 15. № 4(94). С. 220.
- [12] М. В. Федорюк. Матем. сб. 1965. Т. 68(110). С. 81.
- [13] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1989.
- [14] J. J. Morehead. Phys. Rev. A. 1996. V. 53. P. 1285.
- [15] Г. Вейль. Квантовая механика и теория групп. М.: Наука, 1986.
- [16] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Механика. М.: Наука, 1988.
- [17] А. С. Давыдов. Квантовая механика. М.: Наука, 1973.
- [18] Г. А. Бете. Квантовая механика. М.: Мир, 1965.
- [19] S. Scandolo, F. Bassani. Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 6925.
- [20] А. Лихтенберг, М. Либерман. Регулярная и стохастическая динамика. М.: Мир, 1984.
- [21] P. V. Elyutin, J. Shan. Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. P. 5043.
- [22] M. Feingold, A. Peres. Phys. Rev. A. 1986. V. 34. P. 591.
- [23] M. Wilkinson. J. Phys. A. 1987. V. 20. P. 2415.
- [24] В. П. Маслов. Асимптотические методы и теория возмущений. М.: Наука, 1988.

Поступила в редакцию 23.IX.1998 г.,
после доработки 26.X.1998 г.