

具有半单李代数结构的线性非自治量子系统的精确解*

揭泉林 王顺金¹⁾ 韦联福

(西南交通大学现代物理研究所 成都 610031)

摘要 给出了对于具有半单李代数结构的线性量子系统求其精确解的代数力学方法。这个方法通过一系列规范变换,把哈密顿量逐步简化为 Cartan 算子的函数。规范变换的系数由一组常微分方程确定。Schrödinger 方程的完全解通过这组规范变换的逆变换得到。与此同时,还可以得到一组与时间有关的动力学不变量。作为例子,又具体求解了一个 $SU(3)$ 模型。

关键词 代数力学 精确解 规范变换

当需要考虑外界影响时,一个量子系统的哈密顿量通常被取为与时间有关的形式。许多重要的非自治系统具有代数结构,其哈密顿量可以表示为一个李群生成元的线性函数,如一个粒子在 Paul 陷阱中的量子运动具有 $SU(1, 1)$ 结构^[1-3];在离子束动力学中,控制粒子自旋极化的哈密顿量具有 $SU(2)$ 结构^[4]。最近,二能级密度相关的多光子过程的 Jaynes-Cumming 模型被证明具有线性的 $SU(2)$ 结构^[5,6]。另一方面,有些非线性的量子系统可以变换为线性系统,如氢原子的哈密顿量可以通过非线性变换而成为具有 $U(4)$ 结构的线性系统^[7-11]。

对于有代数结构的线性系统,可以用李群和李代数的方法^[12-16]精确求解。然而,现有的方法在处理维数较高的李代数结构时都很复杂。本文针对这一个问题,用代数力学的观点^[1]以及半单李代数的特殊性质,给出一个有效的处理具有半单李代数结构的量子系统的方法。

代数力学是针对非自治量子系统而建立起来的一种非微扰方法,适合于处理具有代数结构的量子系统,现已对一些线性系统,如 $SU(2)$, $SU(1, 1)$ 以及 $h(4)$ 等,作了很成功的处理^[1,4]。这里的关键是通过一系列规范变换,把哈密顿量变换为 Cartan 算子的函数,然后,再利用逆规范变换得到 Schrödinger 方程的完全解。这个方法步骤简捷、物理图象清晰,有明确的经典-量子对应,原则上可以处理任意线性系统。对于具有半单李代数结构的线性系统,代数力学比其它的方法要简捷得多。

1997-01-15收稿

*国家自然科学基金(19975017)、国家教委博士点基金和国家核工业研究基金资助

1) 兰州大学现代物理系和中国高科技中心(世界实验室)客座研究人员

对于一个非自洽的线性量子系统,如果其代数结构是半单的,哈密顿量可表示为:

$$H = \sum_{i=1}^l a_i(t) H_i + \sum_{\alpha=1}^M (b_\alpha(t) E_\alpha + c_\alpha(t) E_{-\alpha}) . \quad (1)$$

这里 H_i 是 Cartan 算子, E_α 是升算子, $E_{-\alpha}$ 是对应的降算子. 众所周知, Schrödinger 方程在经过规范变换

$$H(t) \rightarrow H'(t) = U_g H U_g^{-1} + i \frac{\partial U_g}{\partial t} U_g^{-1}, \quad (2)$$

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi'(t)\rangle = U_g |\psi(t)\rangle \quad (3)$$

之后,其形式保持不变. 这里 $U_g(t)$ 是一个与时间有关的可逆算符, $|\psi(t)\rangle$ 是系统的波函数. 利用这个特性,希望找到一个这样的规范变换,使得经过规范变换之后,哈密顿量成为 Cartan 算子的线性组合:

$$H'(t) = d_1(t) H_1 + \cdots + d_l(t) H_l . \quad (4)$$

下面将证明,这个规范变换 $U(t)$ 的形式可取为 $2M$ 个相继的规范变换,每一个都对应于一个升算子或降算子: $U_g(t) = U_2(t) U_1(t)$, 其中 U_1 和 U_2 分别是由 M 个相继的规范变换构成:

$$U_1(t) = \exp(i f_M(t) E_M) \cdots \exp(i f_1(t) E_1), \quad (5)$$

$$U_2(t) = \exp(i g_M(t) E_{-M}) \cdots \exp(i g_1(t) E_{-1}), \quad (6)$$

系数 $f_\alpha(t)$, $g_\alpha(t)$ 与时间有关,由常微分方程组(8)与(11)以及初始条件 $f_\alpha(0) = g_\alpha(0) = 0$ ($\alpha = 1, 2, \dots, M$) 确定. 这里 E_1, E_2, \dots, E_M 是按照它们所对应的根由小到大排列的.

实际上,经过规范变换 $U_1(t)$ 之后,哈密顿量仍是生成元的线性函数,可以令 E_1, \dots, E_M 的系数为零,这样便得到一组 f_α 所满足的方程:

$$\dot{f}_\alpha = F_\alpha(a_1, \dots, a_p, b_1, \dots, b_M, c_1, \dots, c_M, f_1, \dots, f_M, \dot{f}_1, \dots, \dot{f}_{\alpha-1}), \quad (7)$$

上式的右边是其变量的多项式. 根据半单李代数的特性,(7)式中只含 $\dot{f}_1, \dot{f}_2, \dots, \dot{f}_{\alpha-1}$. 将 $\dot{f}_1, \dot{f}_2, \dots, \dot{f}_{\alpha-1}$ 的表达式代入 \dot{f}_α 的表达式,(7)式便成为常微分方程组的标准形式:

$$\dot{f}_\alpha(t) = F_\alpha(a_1, \dots, a_p, b_1, \dots, b_M, c_1, \dots, c_M, f_1, \dots, f_M), \quad (8)$$

其中 F_α 仍是其变量的多项式,对于初始条件 $f_\alpha(0) = g_\alpha(0) = 0$,这个常微分方程组有唯一的解 $f_1(t), f_2(t), \dots, f_M(t)$.

现在,哈密顿量成为

$$H^{(1)}(t) = \sum_{i=1}^l a'_i(t) H_i + \sum_{\alpha=1}^M c'_\alpha(t) E_{-\alpha}. \quad (9)$$

对 $H^{(1)}(t)$ 作规范变换 $U_2(t)$,使之成为

$$H^{(2)}(t) = \sum_{i=1}^l a''_i(t) H_i + \sum_{\alpha=1}^M c''_\alpha(t) E_{-\alpha}. \quad (10)$$

注意到 $E_\alpha (\alpha = 1, \dots, M)$ 不会在(9)、(10)式中出现. 类似于上面的讨论,通过令 $c''_\alpha(t) = 0$,可以得到 $g_\alpha(t)$ 所满足的方程

$$\dot{g}_\alpha = G_\alpha(a'_1, \dots, a'_p, c'_1, \dots, c'_M, g_1, \dots, g_M), \quad (11)$$

其中 G_α 也是其变量的多项式,从而对于初始条件 $f_\alpha(0) = g_\alpha(0) = 0$,这个方程组的解是唯一的. 这样,哈密顿量便成为所要的形式(4)式. 注意 H_i 的系数仍能是 $a'_i(t)$,即 $d_i(t) = a'_i(t) = a''_i(t)$.

经过以上的规范变换, Schrödinger 方程变成了

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle = (d_1(t)H_1 + \cdots + d_l(t)H_l)|\psi'(t)\rangle . \quad (12)$$

显然, 在 H_1, \dots, H_l 的共同本征表象中, $|\psi'(t)\rangle$ 的完全解为 $\{|\psi'_n(t)\rangle\}$,

$$|\psi'_n(t)\rangle = e^{-i\Theta_n(t)} |\phi_n\rangle , \quad (13)$$

其中 $\Theta_n(t) = \sum_{i=1}^l n_i \int_0^t dt d_i(t)$, 而 $|\phi_n\rangle$ 是 $\{H_i\}$ 的共同本征矢, 其对应的本征值为 $n = (n_1, \dots, n_l)$. 这些本征矢和本征值可以通过李代数的理论得到, $H_i|\phi_n\rangle = n_i|\phi_n\rangle$. 通过(3)式, 便得到了 $|\psi(t)\rangle$ 的完全解

$$|\psi_n(t)\rangle = \sum_m e^{-i\Theta_n(t)} D_{mn}(t) |\phi_m\rangle , \quad (14)$$

其中 $D_{mn}(t)$ 是 $U_g^{-1}(t)$ 的矩阵元,

$$D_{mn}(t) = \langle \phi_m | U_1^{-1}(t) U_2^{-1}(t) | \phi_n \rangle . \quad (15)$$

对于所取的 $U_g(t)$ 的形式, 其逆的矩阵元 $D_{mn}(t)$ 可以用代数的方法来计算. 设 $|0\rangle$ 为李代数 G 的某个不可约表示的最低权态, 即用降算子作用在 $|0\rangle$ 上等于零 ($E_\alpha|0\rangle = 0$), 那么 $|\phi_n\rangle$ 可以用升算子作用在 $|0\rangle$ 上来表示, 即 $|\phi_n\rangle = c_n E_1^{n_1} E_2^{n_2} \cdots E_M^{n_M} |0\rangle$, 其中 c_n 是归一化常数. 不失一般性, 可令 $E_{-\alpha} = E_\alpha^\dagger$, 从而 $\langle 0 | E_\alpha = 0$. 这样(15)式便可写成

$$D_{mn}(t) = c_m^* c_n \langle 0 | E_{-M}^{n_M}(t) \cdots E_{-2}^{n_2}(t) E_{-1}^{n_1}(t) E_1^{n_1}(t) E_2^{n_2}(t) \cdots E_M^{n_M}(t) | 0 \rangle , \quad (16)$$

其中 $E_\alpha(t) = U_2^{-1}(t) E_\alpha U_2(t)$; $E_{-\alpha}(t) = U_1(t) E_{-\alpha} U_1^{-1}(t)$. $E_{\pm\alpha}(t)$ 可以通过半单李代数的对易关系式来计算, 它们都是 $\{H_p E_{\pm\alpha}\}$ 的线性函数. 类似于 Wick 定理, 可以用对易关系来重新安排 $D_{mn}(t)$ 中 $H_p E_{\pm\alpha}$ 的次序, 使得 E_α 在 H_i 的左边, 而 $E_{-\alpha}$ 在 H_i 的右边. 利用 $E_\alpha|0\rangle = 0$ 和 $\langle 0 | E_\alpha = 0$, 便得到了 $D_{mn}(t)$. 当然, 这只是计算 $D_{mn}(t)$ 的一般方法, 对于具体的问题, 可以进一步简化步骤.

通过以上的规范变换, 还可以得到一组互易的与时间有关的动力学不变量^[1], $I_i(t) = U_g^{-1}(t) H_i U_g(t)$. 这里 $I_i(t)$ 是生成元的线性函数, 它们满足方程 $i \frac{\partial}{\partial t} I_i(t) + [I_i(t), H(t)] = 0$.

从这组动力学不变量, 可以同样的构造 Schrödinger 方程的完全解^[18].

当哈密顿量(1)式不显含时间时, 通常对其本征值与本征矢感兴趣. 上面所讨论的方法, 也可以用来求哈密顿量的本征值与本征矢. 这时, 同样是用一个规范变换 U_g 来将哈密顿量化为 Cartan 算子的线性组合. U_g 的形式和 $U_g = U_2 U_1$ 一样, 其中 U_1 和 U_2 分别是由 M 个相继的规范变换构成:

$$\left. \begin{aligned} U_1 &= \exp(i f_M E_M) \cdots \exp(i f_1 E_1), \\ U_2 &= \exp(i g_M E_{-M}) \cdots \exp(i g_1 E_{-1}). \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

唯一与含时情况不同的是, 把 U_g 的系数 f_α, g_α 取为与时间无关. 这时对哈密顿量的变换实际上是一个相似变换, $H \rightarrow H' = U_g H U_g^{-1}$. 与含时情况一样, 为了把哈密顿量变换成 Cartan 算子的线性组合, $H' = d_1 H_1 + \cdots + d_l H_l$ 系数 f_α, g_α 应满足方程

$$F_\alpha(a_1, \dots, a_p b_1, \dots, b_M c_1, \dots, c_M f_1, \dots, f_M) = 0, \quad (18)$$

$$G_\alpha(a'_1, \dots, a'_p c'_1, \dots, c'_M g_1, \dots, g_M) = 0, \quad (19)$$

其中 F_α, G_α 分别与(8)、(11)式的右边相一致的, 都是其变量的多项式. 这样的代数方程组

是可以精确求解的。其解的存在性可以用李代数理论严格证明^[17—21]。由于 H' 与 Cartan 算子对易，从而有共同的本征矢 $|\phi_n\rangle$ ，对应的本征值为 $E_n = d_1 n_1 + \dots + d_n n_n$ 。这也即是哈密顿量 H 的本征值，其对应的本征矢为 $|\Phi_n\rangle = \sum_m D_{mn} |\phi_m\rangle$ 。 $|\Phi_n\rangle$ 的展开系数 $D_{mn} = \langle \phi_m | U_g^{-1} |\phi_n\rangle$ 可用上述的方式计算。

作为对上面一般讨论的具体化，我们来计算一个 $SU(3)$ 模型：在旋转波近似下 (RWA)^[22] 3 个一维振子的相互作用。其哈密顿量取为

$$H = H_0 + H_I = \sum_{i=1}^3 x_i(t) a_i^+ a_i + \sum_{i \neq j} x_{ij}(t) a_i^+ a_j, \quad (20)$$

其中 H_0 是 3 个独立的谐振子，而 H_I 是它们之间的相互作用； a_i, a_i^+ 满足对易关系 $[a_i, a_j^+] = \delta_{ij}, [a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0$ ； $x_{ij}(t)$ 是时间 t 的非奇异函数。算符 $A_{ij} = a_i^+ a_j$ 构成 $U(3)$ 李代数的 9 个基矢，对易关系为 $[A_{ij}, A_{kl}] = \delta_{jk} A_{il} - \delta_{ik} A_{lj}$ 。由于算子 $\sum_{i=1}^3 a_i^+ a_i$ 与这个代数中所有的其它算子对易，所以这个系统的代数结构实际上可视为 $SU(3)$ 。这个 8 维李代数的 Cartan 算子可取为 $(A_{11} - A_{22}, A_{22} - A_{33})$ ，3 个升算子为 (A_{12}, A_{13}, A_{23}) ，对应的 3 个降算子为 (A_{21}, A_{31}, A_{32}) 。不可约表示空间可取为 Cartan 算子的共同本征态 $(|\phi(n_1, n_2)\rangle = |n_1, n_2, n - n_1 - n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! (n - n_1 - n_2)!}} a_1^{+n_1} a_2^{+n_2} a_3^{+(n - n_1 - n_2)} |0\rangle, (0 \leq n_1, n_2 \leq n))$ ，它们可以用升算子 A_{13}, A_{23} 作用在最低权态 $|0, 0, n\rangle$ 上来表示。整个 Hilbert 空间是所有的这些不可约表示空间的直和。规范变换取为

$$U_g = \exp(f_{31} A_{31}) \exp(f_{21} A_{21}) \exp(f_{32} A_{32}) \exp(f_{12} A_{12}) \exp(f_{23} A_{23}) \exp(f_{13} A_{13}) \quad (21)$$

与时间有关的系数 $f_{ij}(t)$ 由下列常微分方程确定：

$$\left. \begin{aligned} -i\dot{f}_{13} &= x_{13} - x_{11} f_{13} - x_{31} f_{13}^2 - x_{12} f_{23} + f_{13} (x_{33} - x_{32} f_{23}), \\ -i\dot{f}_{23} &= x_{23} - x_{22} f_{23} + x_{33} f_{23} - x_{32} f_{23}^2 - f_{13} (x_{21} + x_{31} f_{23}), \\ -i\dot{f}_{12} &= x_{12} + x_{32} f_{13} - f_{12} (x_{11} + x_{31} f_{13}) - f_{12}^2 (x_{21} + x_{31} f_{23}) + \\ &\quad f_{12} (x_{22} + x_{32} f_{23}), \\ -i\dot{f}_{32} &= x_{32} - x_{31} f_{12} - (x_{33} - x_{31} f_{13} - x_{32} f_{23}) f_{32} + \\ &\quad (x_{22} + x_{32} f_{23} - f_{12} (x_{21} + x_{31} f_{23})) f_{32}, \\ -i\dot{f}_{21} &= x_{21} + x_{31} f_{23} - f_{21} (x_{22} + x_{32} f_{23} - f_{12} (x_{21} + x_{31} f_{23})) + \\ &\quad f_{21} (x_{11} + x_{31} f_{13} + f_{12} (x_{21} + x_{31} f_{23})), \\ -i\dot{f}_{31} &= x_{31} - (x_{33} - x_{31} f_{13} - x_{32} f_{23}) f_{31} + (x_{11} + x_{31} f_{13} + \\ &\quad f_{12} (x_{21} + x_{31} f_{23})) f_{31} + (x_{21} + x_{31} f_{23}) f_{32}. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

经过规范变换之后，哈密顿量成为

$$H = \sum_{i=1}^3 d_i(t) A_{ii}, \quad (23)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} d_1 &= x_{11} + x_{31} f_{13} + f_{12} (x_{21} + x_{31} f_{23}), \\ d_2 &= x_{22} + x_{32} f_{23} - f_{12} (x_{21} + x_{31} f_{23}), \\ d_3 &= x_{33} - x_{31} f_{13} - x_{32} f_{23}. \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

所以 Schrödinger 方程的完全解为

$$|\psi_{n_1, n_2}(t)\rangle = e^{-i\Theta_n(t)} \sum_{m_1, m_2} D_{m_1, m_2; n_1, n_2} |\phi(m_1, m_2)\rangle, \quad (25)$$

其中 $\Theta_n(t) = \int_0^t (n_1 d_1(t) + n_2 d_2(t) + (n - n_1 - n_2) d_3(t)) dt$, 而 $U_g^{-1}(t)$ 的矩阵元 $D_{m_1, m_2; n_1, n_2}$ 可以用上述所讨论的方法来计算, 它是 f_{ij} 的函数. 这个函数只依赖于代数结构, 与具体的哈密顿量的形式无关. 经过一些代数运算可以得到

$$D_{m_1, m_2; n_1, n_2}(f_{ij}) = c \langle 0, 0, n | (A_{32}(t))^{m_1} (A_{31}(t))^{m_2} (A_{13}(t))^{n_1} (A_{23}(t))^{n_2} | 0, 0, n \rangle, \quad (26)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} c &= c(m_1, m_2) c(n_1, n_2), \\ A_{13}(t) &= A_{13} - A_{23} f_{21} + A_{11} f_{31} - A_{21} f_{21} f_{31} + A_{12} f_{32} - A_{22} f_{21} f_{32} + \\ &\quad A_{33}(-f_{31} + f_{21} f_{32}) + A_{31}(-f_{31}^2 + f_{21} f_{31} f_{32}) + A_{32}(-(f_{31} f_{32}) + f_{21} f_{32}^2), \\ A_{23}(t) &= A_{23} + A_{21} f_{31} + A_{22} f_{32} - A_{33} f_{32} - A_{31} f_{31} f_{32} - A_{32} f_{32}^2, \\ A_{31}(t) &= A_{31} - A_{32} f_{12} + A_{11} f_{13} - A_{12} f_{12} f_{13} + A_{21} f_{23} - A_{22} f_{12} f_{23} + \\ &\quad A_{33}(-f_{13} + f_{12} f_{23}) + A_{13}(-f_{13}^2 + f_{12} f_{13} f_{23}) + A_{23}(-(f_{13} f_{23}) + f_{12} f_{23}^2), \\ A_{32}(t) &= A_{32} + A_{12} f_{13} + A_{22} f_{23} - A_{33} f_{23} - A_{13} f_{13} f_{23} - A_{23} f_{23}^2. \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

将(27)式代入(26)式, 并将 $A_{ij}|0, 0, n\rangle$ 写成 $a_i^+ a_j^-$ 和 $\frac{1}{\sqrt{n!}} a_3^{+n} |0, 0, 0\rangle$, $D_{m_1, m_2; n_1, n_2}$ 便可以通过

Wick 定理直接计算出来.

通过以上的讨论, 给出了求解具有半单李代数结构的线性量子系统的 Schrödinger 方程的统一方法. 这里的关键是选取规范变换 $U_g(t)$, 将哈密顿量变换为 Cartan 算子的线性函数. 由于我们所选取的形式, 规范变换的系数由一组只含多项式的常微分方程组确定; $U_g^{-1}(t)$ 矩阵元, 以及波函数的展开分量可以用代数的方法求得. 这个方法的另一个优点是, 把求解本征值与本征矢的问题化为求解只含多项式的代数方程, 从而可以充分利用代数的方法来求解. 以上的方法适合于建立机械算法.

参 考 文 献

- [1] Wang S J, Li F L, Weiguny A. Phys. Lett., 1993, **A180** (1):189—196
- [2] Paul W. Rev. Mod. Phys., 1990, **62** (3):531—540
- [3] Brown L S. Phys. Rev. Lett., 1991, **66** (5):527—529
- [4] Wang S J, Zuo W, Weiguny A et al. Phys. Lett., 1994, **A196** (1):7—12; Wang S J, Zuo W. Phys. Lett., 1994, **A196** (1):13—19; Zuo W, Wang S J. Acta Physica Sinica, 1995, **44** (9):1353—1362, 1363—1372
- [5] Shore B W, Knihgt P L. J. Mod. Optics, 1993, **40** (7):1195—1238
- [6] Yu S, Rauch H, Zhang Y. Phys. Rev., 1995, **A52** (4):2585—2590
- [7] Kibler M, Negadi T. Lett. Nuovo Cimento, 1980, **37** (1):225—229
- [8] Cornish F H. J. Phys., 1984, **A17** (2):323—334.
- [9] Chen A C, Kibler M. Phys. Rev., 1985, **A31** (7):3960—3969
- [10] Xu B W, Zeng Q. Acta Physica Sinica, 1991, **40** (8):1212—1216
- [11] Xu B W, Gu W H. Acta Physica Sinica, 1993, **42** (7):1050—1056
- [12] Wei J, Norman E. J. Math. Phys., 1963, **4** (1):575—582
- [13] Shi S, Rabitz H. J. Chem. Phys., 1988, **88** (12):7508—7521

- [14] Gilmore R, Yuan J M. *J. Chem. Phys.*, 1987, **86** (1):130—139; 1989, **91**(2):917—923
- [15] Recamier J, Micha D A, Gazdy B. *Chem. Phys. Lett.*, 1985, **119** (5): 383—387; *J. Chem. Phys.*, 1986, **85** (9):5093—5100
- [16] Benjamin I. *J. Chem. Phys.*, 1986, **85** (10):5611—5624
- [17] Gilmore R. *Lie Group, Lie Algebra and Some of Their Applications*. New York: Wiley, 1974; Cheng J Q. *Group Representation Theory for Physicists*. Singapore: World Scientific, 1989
- [18] Lewis H R. *J. Math. Phys.*, 1969, **10** (8):1458—1473
- [19] Wan Zhexian. *Lie Algebra*(in Chinese). Beijin: Scientific Press, 1964
(万哲先. 李代数. 北京: 科学出版社. 1964)
- [20] Singh S. *Phys. Rev.*, 1982, **A25** (7):3206—3211
- [21] Bonatsos D, Daskaloyannis C, Lalazissis G A. *Phys. Rev.*, 1993, **A47** (7):3448—3452
- [22] Khidakeli V. *Phys. Rev.*, 1995, **E52** (3):2510—2521

Exact Solutions of Non-autonomous Quantum Systems With Semisimple Lie Algebraic Structure

Jie Quanlin Wang Shunjin Wei Lianfu

(Institute of Modern Physics, Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031)

Abstract For quantum systems with semi-simple Lie algebraic structures, the exact solutions of the equations of motion are obtained by means of algebraic dynamics. The Hamiltonian is transformed into a linear function of Cartan operators by a set of gauge transformations. The coefficients of the gauge transformations are determined by a set of ordinary differential equations. From the inverses of these gauge transformations, the solutions of the Schrodinger equation, as well as a set of dynamic constants of motion (dynamic invariant operators) are obtained. An $SU(3)$ model serves as an example.

Key words algebraic dynamics, exact solution, gauge transformation