КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 530.145

О КЛАССИЧЕСКОМ И КВАНТОВОМ УСЛОВИЯХ КУБО—МАРТИНА—ШВИНГЕРА ДЛЯ ОДНОМЕРНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

А. Р. Майков

(кафедра математики)

Под системой Пуассона будем понимать тройку $\langle \mathfrak{M}, \cdot, \alpha^t \rangle$, где $\mathfrak{M}$ — алгебра Ли относительно скобок Пуассона (СП) $\{,\}$, $\cdot$ — коммутативный закон умножения на $\mathfrak{M}$ и α^t — автоморфизмы алгебраической структуры $\mathfrak{M}$, причем

$$\{A\cdot B, C\}=A\cdot\{B, C\}+B\cdot\{A, C\}\ \forall A, B, C\in\mathfrak{M}.$$

Мы будем рассматривать два типа систем Пуассона — $\mathfrak{P}_{\mathrm{cl}}$ и $\mathfrak{P}_{\mathrm{qm}}$.

1. $\mathfrak{A}\in\mathfrak{P}_{\mathrm{cl}}$, если $\mathfrak{A}$ — алгебра наблюдаемых классической гамильтоновой системы, т. е. функций на ее фазовом многообразии. На $\mathfrak{A}$ стандартным способом с помощью некоторой симплектической формы определены СП, закон умножения — поточечный и

$$\frac{d}{dt}\alpha^t[r]=\{\alpha^t[r], h\}.$$

2. $\mathfrak{R}(\mathscr{H})\in\mathfrak{P}_{\mathrm{qm}}$, если $\mathfrak{R}(\mathscr{H})$ — алгебра наблюдаемых некоторой квантовой системы, т. е. линейных самосопряженных операторов гильбертова пространства $\mathscr{H}$, причем $\{R, S\}\equiv(i/k)[R, S]$, $R\cdot S\equiv(RS+SR)/2$, где $RS(\psi)=R(S(\psi))$, а автоморфизмы $\widehat{\alpha}^t$ удовлетворяют условию

$$\frac{d}{dt}\widehat{\alpha}^t[R]=(i/k)[\widehat{\alpha}^t[R], H],\ k>0 \text{ — число.}$$

Квантованием классической системы будем называть любой гомоморфизм алгебры Ли $\mathfrak{A}$ в некоторую алгебру $\mathfrak{R}(\mathscr{H})\in\mathfrak{P}_{\mathrm{qm}}$, а состоянием на $\mathfrak{A}$ или $\mathfrak{R}(\mathscr{H})$ — положительный линейный функционал ω, для которого $\omega(I)=1$, где I — единица соответствующей системы Пуассона.

Если на $\mathfrak{A}$ и $\mathfrak{R}(\mathscr{H})$ определены также топологические структуры, то, как известно из [1] и [2], требование устойчивости состояний равновесия относительно малых возмущений приводит к условиям Кубо—Мартина—Швингера, имеющих для $\mathfrak{A}$ и $\mathfrak{R}(\mathscr{H})$ различную форму:

$$\omega_{\mathrm{cl}}^{(\beta)}(\{s, \alpha^t[r]\})=\beta\frac{d}{dt}\omega_{\mathrm{cl}}^{(\beta)}(s\cdot\alpha^t[r])\ \forall s, r\in\mathfrak{A}\quad (KMS_{\mathrm{cl}}),$$

$$\omega_{\mathrm{qm}}^{(\beta)}(S\widehat{\alpha}^{t+i\beta}[R]-\widehat{\alpha}^t[R]S)=0\ \forall\ R, S\in\mathfrak{R}(\mathscr{H})\quad (KMS_{\mathrm{qm}})$$

(β — обратная температура). Очевидно, любой гомеоморфизм $J:\mathfrak{A}\to\mathfrak{R}(\mathscr{H})$ удовлетворял бы условию:

$$\omega_{\mathrm{cl}}^{(\beta)}(r)=\omega_{\mathrm{cl}}^{(\beta)}(J(r))\qquad\forall\beta, \forall r\in\mathfrak{A}. \tag{1}$$

Квантования, однако, сохраняют лишь структуру алгебры Ли, и поэтому выполнение (1) для них не обязательно. Вопрос о существовании квантований со свойством (1) имеет самостоятельный интерес и, насколько известно автору, ранее не рассматривался. Ниже мы покажем,

что для одномерных классических систем определенного типа такое квантование всегда существует, а для линейной системы построим его в явном виде. Приводится пример квантования, для которого (1) не выполнено.

I. **Линейная система.** Пусть фазовое пространство M системы совпадает с $\mathbf{R}^2$, а СП порождаются канонической формой $\theta = dp \wedge dq$:

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial q} - \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial g}{\partial p}.$$

Положим для простоты $h = 0{,}5\ (p^2 + q^2)$. Зададим на фазовом пространстве структуру множества $\mathbf{C}$ следующим образом. Пусть $x_1 = \begin{pmatrix} p_1 \\ q_1 \end{pmatrix}$, $x_2 = \begin{pmatrix} p_2 \\ q_2 \end{pmatrix}$. Положим

$$x_1 + x_2 = \begin{pmatrix} p_1 + p_2 \\ q_1 + q_2 \end{pmatrix},\ zx = (\operatorname{Re} z + \operatorname{Im} zL)\,x;\ L = \begin{pmatrix} 0, & 1 \\ -1, & 0 \end{pmatrix}$$

и введем скалярное произведение $\langle x_1, x_2 \rangle = \theta(Lx_1, x_2) - i\theta(x_1, x_2)$. Как известно из [3], такая структура на M позволяет реализовать квантование алгебры Ли, порождаемой в $\mathfrak{A}$ наблюдаемыми p и q, как сигалово квантование, а именно:

$$X_k \equiv \pi_k(x) = \sqrt{k/2}\,(a^+(x) + a(x)),\ x \in M, \tag{2}$$
$$H_k \equiv \pi_k(h) = kN + kc,\ c \in \mathbf{R};\ \pi_k(I) = Id,$$

где $a^+(x)$, $a(x)$ — операторы рождения и уничтожения, N — оператор числа частиц (см. [5]), действующие в $\mathscr{H} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathbf{C}^{(n)}, \mathbf{C}^{(n)} = \bigotimes^{n} \mathbf{C}$. Индексы k в X_k и H_k, а также β в $\omega^{(\beta)}$ будут опущены там, где это не вызовет недоразумений.

Распространим теперь процедуру квантования на всю алгебру $\mathfrak{A}_0$ полиномов от p и q следующим образом:

$$\pi_k(p^n q^m) = \frac{1}{(n+m)!}\sum_i \Lambda_i(\underbrace{P, \ldots, P}_{n}, \underbrace{Q, \ldots, Q}_{m}),$$

где Λ_i — произведения операторов $P = \pi_k(p)$ и $Q = \pi_k(q)$, получаемые всевозможными перестановками их. Для произвольных полиномов $\mathscr{P}(p, q) \in \mathfrak{A}_0$ получаем $\pi_k(\mathscr{P})$ продолжением по линейности. Известно [4], что полученное отображение $\pi_k : \mathfrak{A}_0 \to \mathfrak{N}(\mathscr{H})$ является квантованием.

Если наблюдаемые не зависят от времени явно, то

$$\widehat{\alpha}^{t+i\beta}[R] = \exp(-\beta H/k)\,\widehat{\alpha}^{t}[R]\exp(\beta H/k).$$

Пусть $\{\varphi^{(m)}\}_{m=0}^{\infty}$ — базис в $\mathscr{H}$, состоящий из «m-частичных» векторов. Поэтому ω_{qm} допускает разложение

$$\omega_{qm}(B) = \sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m(\varphi^{(m)}, B\varphi^{(m)})\ \forall B \in \mathfrak{N}(\mathscr{H}),$$
$$\sum_{m=0}^{\infty} \gamma_m = 1, \tag{3}$$

а ряд

$$\exp(\beta H/k)\,\varphi^{(m)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{\beta}{k}\right)^n H^n \varphi^{(m)} \tag{4}$$

сходится по норме для любого $\varphi^{(m)}$.

Далее нам потребуются соотношения:

$$\omega_{qm}(X^{2j}) = 1\cdot 3\cdot \ldots (2j-1)\omega^j(H),\ \omega_{qm}(X^{2j+1}) = 0;\ j=0,\ 1, \ldots$$
$$\omega_{qm}(H) = (k/2)\,\mathrm{sh}\,\beta(\mathrm{ch}\beta-1)^{-1};\ X=P \text{ или } X=Q. \tag{5}$$

Для доказательства (5) достаточно установить, что

$$(\varphi^{(m)}, Xe^{-\beta H/k}Ye^{\beta H/k}\varphi^{(m)}) = (\varphi^{(m)}, ((\mathrm{sh}\,\beta)X[Y, H] + (\mathrm{ch}\,\beta)XY)\varphi^{(m)}), \tag{6}$$

где X, Y, H задаются с помощью (2), причем x и y — либо p, либо q; (6) будет следовать из (4) и свойств операторов a, a^+, N. Воспользовавшись затем (3) и (KMS_{qm}), можно получить (5).

Пусть

$$k = k(\beta) = 2(\mathrm{ch}\,\beta-1)(\mathrm{sh}\,\beta)^{-1}\beta^{-1}. \tag{7}$$

Тогда

$$\omega_{qm}^{(\beta)}(H_k) = \omega_{qm}^{(\beta)}(\pi_{k(\beta)}(h)) = \beta^{-1}. \tag{8}$$

Прямым вычислением можно показать, что

$$\omega_{qm}(\pi_k(p^nq^s)) = \begin{cases} \dfrac{(n-1)(n-3)\ldots 3\cdot 1}{(s+1)(s+3)\ldots,(s+n-1)}\varphi_{qm}(\pi_k(q^{s+n}));\ n \text{ — четное} \\ 0,\ n \text{ — нечетное.} \end{cases} \tag{9}$$

Из (9) легко получить:

$$\omega_{qm}^{(\beta)}(\pi_{k(\beta)}(\{r, s\})) = \beta\omega_{qm}^{(\beta)}(\pi_{k(\beta)}(r\cdot\{h, s\})) \quad \forall\ \beta. \tag{10}$$

Формулы типа (9) можно получить и для ω_{cl}, кроме того,

$$\omega_{cl}^{(\beta)}(h) = \omega_{cl}^{(\beta)}\left(\frac{1}{2}(p^2+q^2)\right) = \frac{1}{\beta}\omega_{cl}^{(\beta)}(\{p, q\}) = \frac{1}{\beta},$$

Поэтому на алгебре $\mathfrak{A}_0$ состояние ω_{cl} будет определено однозначно. Вместе с (10) это приводит к такому выводу: Утверждение 1. Для системы с функцией Гамильтона $h=0{,}5\,(p^2+q^2)$ квантование $\pi_\beta \equiv \pi_{k(\beta)}$, где $k(\beta)$ выбрано в виде (7), обеспечивает справедливость соотношения

$$\omega_{qm}^{(\beta)}(\pi_\beta(r)) = \omega_{cl}^{(\beta)}(r) \quad \forall\ r\in\mathfrak{A}_0.$$

Обобщение утверждения 1 на случай $h=c_1^2p^2+c_2^2q^2$ произвольной линейной системы не встречает затруднений.

II. **Нелинейная система.** Предположим, что существует «линеаризация», т. е. такое каноническое преобразование g симплектического линейного пространства данной нелинейной системы $g: M\to\mathbf{R}^2$, что $\bar{h}(p, q) \equiv h(g^{-1}(p', q')) = \gamma((p')^2+\delta^2(q')^2)$, $\bar{h}$ — функция Гамильтона нелинейной системы.

Рассмотрим множество $\mathfrak{B}_0$ наблюдаемых нелинейной системы, состоящее из функций вида

$$\Pi(p, q) = \mathscr{P}(g(p, q)). \tag{11}$$

Можно убедиться, что (11) устанавливает алгебраический изоморфизм $G: \mathfrak{B}_0\to\mathfrak{A}_0$ и что этого достаточно, чтобы $\omega_{cl}(\Pi) = \omega_{cl}(G(\Pi))$. Тогда из утверждения 1 следует Утверждение 2. Для одномерных классических систем, допускающих «линеаризацию», существуют нетривиальная подалгебра $\mathfrak{B}_0$ и квантование π_β, такое, что выполнено равенство

$$\omega_{cl}^{(\beta)}(b) = \omega_{qm}^{(\beta)}(\tilde{\pi}_\beta(b)) \quad \forall\ b\in\mathfrak{B}_0.$$

Для доказательства достаточно выбрать $\tilde{\pi}_\beta = \pi_{k(\beta)}(G(b))$.

Отметим без доказательства, что не зависящее от β каноническое квантование нелинейного осциллятора с функцией Гамильтона

$$\tilde{h}=c_1p^2+c_2q^2+V(q),\ c_1,\ c_2>0,\ 0\leqslant V(q)\in C^\infty(\mathbf{R})$$

не удовлетворяет (1).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Aizenmann M. et al. Comm. Math. Phys., 1976, 48, N 1, p. 1. [2] Haag R., Kastler D., Trysh-Pohlmeyer E. Comm. Math. Phys., 1974, 38, N 3, p. 173. [3] Gallone F., Sparzani A. J. Math. Phys., 1979, 20, N 1, p. 1375. [4] Березин Ф. А. Изв. АН СССР, сер. матем., 1974, 38, № 5, с. 1116. [5] Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. М.: Мир, 1978, т. 2, гл. X, § 7.

Поступила в редакцию
09.04.82

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1983, Т. 24, № 3

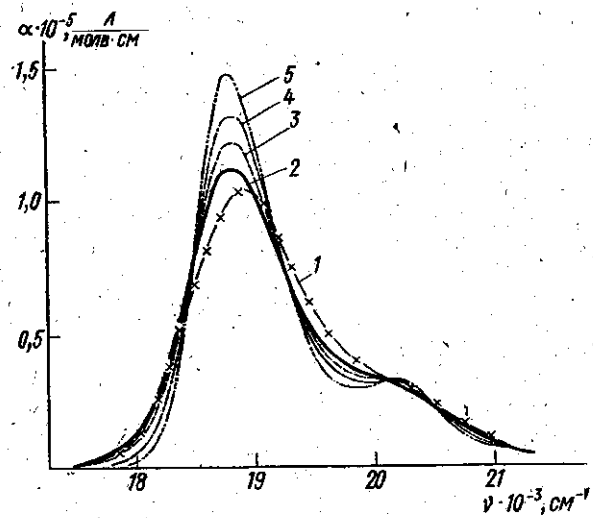
УДК 535.37

О ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ СЛОЖНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ

Л. В. Левшин, Б. Д. Рыжиков, С. И. Стальмахович

(кафедра общей физики для физического факультета)

Изучение влияния температуры на спектральные характеристики органических растворов проводилось в ряде работ, например в [1—5]. Однако до настоящего времени отсутствует единая теория, объясняющая наблюдаемые температурные изменения спектров. В работе [3] была предложена модель, объясняющая влияние температуры на спектры поглощения изменением распределения молекул по колебательным подуровням основного и возбужденных состояний. Согласно [4] падение поглощательной способности раствора при повышении температуры обусловлено переходом части молекул красителя в бесцветную форму. Однако по теоретическим представлениям [6] интегральная поглощательная способность молекул должна слабо меняться в достаточно широком интервале температур. Цель настоящей работы состояла в исследовании влияния температуры на спектры поглощения молекул красителей с учетом возможных температурных изменений свойств растворителя.



Температурные изменения электронных спектров поглощения этанольного раствора родамина 6Ж ($C=2{,}5\cdot10^{-6}$ м/л): +60 °С (*1*), +20 °С (*2*), —20 °С (*3*), —60 °С (*4*) и —100 °С (*5*)