

КОНЕЧНОМЕРНЫЕ МОДЕЛИ НЕЛИНЕЙНОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Апонин Ю.М., Апонина Е.А.

(г. Пушкино, Московская обл.)

Конечномерные модели нелинейной квантовой механики рассматриваются как комплексные динамические системы (КДС), поведение которых описывается обыкновенными дифференциальными уравнениями в конечномерном комплексном пространстве состояний. Вводятся классы нелинейных КДС, наследующих определённые свойства моделей линейной квантовой теории. Исследуются КДС с унитарной нелинейностью. Решается задача описания класса КДС, обладающих свойством замкнутости динамического уравнения для матрицы плотности. Выделенный при этом класс систем содержит конечномерные модели линейной квантовой механики и существенно шире класса унитарно-нелинейных конечномерных моделей.

FINITE-DIMENSIONAL MODELS OF NONLINEAR QUANTUM MECHANICS

Yu.M. Aponin, E.A. Aponina

(Pushchino, Moscow Region)

Finite-dimensional models of quantum mechanics fall in to the complex dynamical systems (CDS), which behavior is determined by ordinary differential equations in a finite-dimensional complex state space. The alternative classes of nonlinear CDS, which inherit some of the features of linear quantum theory models, are introduced. The CDS with unitary nonlinearity are studied. A description is given of CDS with closed dynamical equation for density matrix. This class of systems is more extensive than the class of CDS with unitary nonlinearity.

Введение

Конечномерные модели квантовой механики относятся к классу комплексных динамических систем, поведение которых описывается обыкновенными дифференциальными уравнениями в конечномерном комплексном пространстве состояний:

$$i\hbar \dot{z} = F(z), \quad z = (z_1, \dots, z_n)^T \in \mathbb{C}^n, \quad (1)$$

где $\dot{z} = dz/dt$, t – время, \hbar – постоянная Планка. При этом состояние системы характеризуется дискретным аналогом волновой функции комплексным вектором z .

К классу систем вида (1) относятся, в частности, и конечномерные модели линейной квантовой механики:

$$i\hbar \dot{z} = A z, \quad A = H + iD, \quad (2)$$

удовлетворяющие одному из основных принципов квантовой теории 20-х годов – принципу суперпозиции состояний. Здесь $H = [H_{\alpha\beta}]$, $D = [D_{\alpha\beta}]$ – эрмитовы ($n \times n$)- матрицы с элементами $H_{\alpha\beta}$, $D_{\alpha\beta} \in \mathbb{C}$.

В «Фейнмановских лекциях по физике» [1] приводятся многочисленные примеры квантовомеханических систем, поведение которых описывается гамильтоновыми ($D = 0$) моделями вида (2). Линейные модели, не являющиеся гамильтоновыми ($D \neq 0$), используются в теории открытых квантовых систем, взаимодействующих со своим окружением посредством обмена возбуждениями [2, 3].

Одной из наиболее известных конечномерных моделей нелинейной квантовой механики является дискретное нелинейное уравнение Шредингера (ДНШ), см. [4]. Естественное обобщение ДНШ представляет следующая динамическая система с унитарной нелинейностью:

$$i\hbar \dot{z}_\alpha = \sum_{\beta=1}^n A_{\alpha\beta} z_\beta + z_\alpha \sum_{\beta=1}^n B_{\alpha\beta} |z_\beta|^2, \quad \alpha=1, \dots, n, \quad (3)$$

которая используется, например, при математическом моделировании динамики джозефсоновских переходов [5]. Эту систему можно рассматривать также как обобщение дискретного аналога интегро-дифференциального уравнения самосогласованного поля, описывающего движение квантовой частицы в поле, кото-

рое изменяется самой частицей (см. [6], стр. 87 – 88).

Другие примеры нелинейных комплексных систем обыкновенных дифференциальных уравнений можно найти в работах по математическому моделированию динамики возбуждений биомолекулярных и надмолекулярных субклеточных структур [7– 10]. Уравнения такого рода возникают при математическом моделировании динамики экситонных возбуждений в белках [7] и мембранах [8], при моделировании переноса электрона в ДНК [9] и фотореакционном центре [10].

В связи с построением моделей нелинейной квантовой механики встаёт ряд задач по описанию и исследованию различных классов комплексных динамических систем вида (1), наследующих определённые свойства моделей линейной квантовой теории.

Например, одним из характерных свойств линейной модели (2) является замкнутость эволюционного уравнения для матрицы плотности $\rho = z z^*$ в силу системы (2) имеет место тождество $i\hbar\dot{\rho} = A\rho - \rho A^*$. Существует ли простое описание класса нелинейных моделей вида (1), обладающих аналогичным свойством замкнутости динамического уравнения для матрицы плотности?

С другой стороны, известно, что условия консервативности или диссипативности линейной модели (2) очень просто формулируются в виде определённых ограничений на матрицу D . Существуют ли простые формулировки условий консервативности и диссипативности, а также условий гамильтоновости и закрытости для более широкого класса нелинейных моделей, например, унитарно-нелинейных динамических систем вида (3)?

В настоящей статье даются ответы на поставленные два вопроса.

Диссипативные, консервативные, закрытые и гамильтоновы комплексные динамические системы

Далее предполагается, что компоненты векторного поля системы (1), $F = (F_1, \dots, F_n)^T$, являются гладкими функциями на \mathbb{C}^n , т.е. они бесконечно дифференцируемы как функции $2n$ вещественных координат в пространстве \mathbb{C}^n .

Напомним, что в пространстве гладких функций на \mathbb{C}^n действуют линейные дифференциальные операторы $\partial/\partial z_\alpha, \partial/\partial \bar{z}_\alpha$

(см. [11], стр.12). Введём $(n \times n)$ -матрицы $\partial F / \partial z$ и $\partial F / \partial \bar{z}$ с элементами

$$\left(\frac{\partial F}{\partial z} \right)_{\alpha\beta} = \frac{\partial F_\alpha}{\partial z_\beta}, \left(\frac{\partial F}{\partial \bar{z}} \right)_{\alpha\beta} = \frac{\partial F_\alpha}{\partial \bar{z}_\beta}, \alpha, \beta = 1, \dots, n,$$

и для любой гладкой функции $\varphi: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}$ положим

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z^*} = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \bar{z}_1}, \dots, \frac{\partial \varphi}{\partial \bar{z}_n} \right)^T.$$

Кроме того, для любого непустого множества $K \subseteq \mathbb{C}$ обозначим через K_n множество $(n \times n)$ -матриц с элементами из K . Символ *iff* будет использоваться как краткое обозначение логической связки “тогда и только тогда, когда”.

Система (1) называется диссипативной, если всюду в \mathbb{C}^n отрицательна мнимая часть следа её матрицы Якоби: $\text{Im Tr} (\partial F / \partial z) < 0$.

Система (1) называется консервативной, если всюду в \mathbb{C}^n истинно равенство $\text{Im Tr} (\partial F / \partial z) = 0$.

Система (1) называется гамильтоновой, если существует такая гладкая функция $H: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{R}$, что всюду в \mathbb{C}^n истинно равенство $F = \partial H / \partial z^$. Тогда функция H называется функцией Гамильтона системы (1).*

Замечание. Нетрудно убедиться, что диссипативность, консервативность и гамильтоновость системы (1) эквивалентны диссипативности, консервативности и гамильтоновости соответствующей о вещественной системе в \mathbb{R}^{2n} . Например, у диссипативной системы (1) отрицательна дивергенция соответствующего вещественного векторного поля на \mathbb{R}^{2n} . Согласно теореме Лиувилля поток диссипативной (консервативной) системы уменьшает (сохраняет) объём в \mathbb{R}^{2n} . Напомним также, что функция Гамильтона гамильтоновой системы является её первым интегралом.

Одна из возможных квантовомеханических интерпретаций системы (1) состоит в следующем. Уравнение (1) рассматривается как модель динамики возбуждений в системе n сайтов. Переменная z_α интерпретируется как комплексная амплитуда воз-

буждения в сайте α , так что $|z_\alpha|^2$ равно количеству возбуждения, локализованного на сайте α . Тогда количество возбуждения в рассматриваемой системе характеризуется функцией $N = N(z) = z^* z$, $z \in \mathbb{C}^n$.

Эти замечания представляют физическую мотивировку следующего определения.

Система (1) называется закрытой, если функция $N(z)$ является её интегралом, т.е. она постоянна на каждой траектории системы.

Для производной функции N в силу системы (1) легко находим уравнение

$$\hbar \dot{N} = 2 \operatorname{Im} [z^* F(z)], \quad z \in \mathbb{C}^n. \quad (4)$$

Напомним, что любая гамильтонова система (1) является консервативной. Условие закрытости гамильтоновой системы даётся в следующем предложении.

Предложение 1. Пусть система (1) гамильтонова и H – её функция Гамильтона. Система (1) закрыта *iff*

$$H(e^{i\theta} z) = H(z) \text{ при всех } \theta \in \mathbb{R}, z \in \mathbb{C}^n. \quad (5)$$

Доказательство. Рассмотрим функцию

$$\varphi(\theta, z) = H(e^{i\theta} z), \quad \theta \in \mathbb{R}, z \in \mathbb{C}^n. \quad (6)$$

Дифференцируя (6), получим

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \theta}(\theta, z) = 2 \operatorname{Im} [\zeta^* F(\zeta)], \quad \text{где } \zeta = z e^{i\theta}. \quad (7)$$

Предположим теперь, что система (1) закрыта. Тогда в силу (4) имеет место

$$\operatorname{Im} [z^* F(z)] = 0 \text{ при } z \in \mathbb{C}^n. \quad (8)$$

Отсюда и из (7) получаем $\partial \varphi / \partial \theta \equiv 0$. Следовательно, $\varphi(\theta, z) \equiv \varphi(0, z)$ что совпадает с (5).

Обратно, если выполнено условие (5), то $\varphi(\theta, z) \equiv \varphi(0, z)$. Следовательно, $\partial \varphi / \partial \theta \equiv 0$. Но тогда из (4) и (7) получаем $\dot{N} = 0$, т.е. система (1) закрыта. Предложение доказано.

Теорема 2. Система (1) гамильтонова *iff* всюду в \mathbb{C}^n выполнены следующие равенства

$$\left(\frac{\partial F}{\partial z}\right)^* = \frac{\partial F}{\partial \bar{z}}, \quad \left(\frac{\partial F}{\partial \bar{z}}\right)^T = \frac{\partial F}{\partial z}. \quad (9)$$

Доказательство. Пусть система (1) гамильтонова с функцией Гамильтона $H: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Тогда $F = \partial H / \partial z^*$. Дифференцируя это равенство, получим (9). Например,

$$\frac{\partial \overline{F_\beta}}{\partial z_\alpha} = \frac{\partial^2 H}{\partial z_\alpha \partial \bar{z}_\beta} = \frac{\partial^2 H}{\partial \bar{z}_\beta \partial z_\alpha} = \frac{\partial F_\alpha}{\partial \bar{z}_\beta}, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, n,$$

т.е. истинно первое равенство в (9). Второе равенство доказывается аналогично.

Предположим теперь обратное: пусть истинны тождества (9). Тогда из второго равенства в (9) следует, что дифференциальная форма $\omega = F_1 dz_1 + \dots + F_n dz_n$ является $\bar{\partial}$ -замкнутой, т.е. $\bar{\partial}\omega = 0$. Следовательно, на основании теоремы Гротендика – Дольбо о тривиальности групп когомологий (см. [12], стр. 42) эта форма $\bar{\partial}$ -точна. Иными словами, существует такая гладкая функция $W: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}$, что $\omega = \bar{\partial}W$, т.е. истинны тождества

$$F_\alpha = \partial W / \partial \bar{z}_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, n. \quad (10)$$

Полагая $P = \operatorname{Re} W$ и $Q = \operatorname{Im} W$, из (10) и первого равенства в (9) легко получаем следующие тождества: $\partial^2 Q / \partial z_\alpha \partial \bar{z}_\beta = 0$ ($\alpha, \beta = 1, \dots, n$), которые показывают, что $Q(z)$ – плюригармоническая функция. Следовательно, существует такая голоморфная функция G , что $Q = \operatorname{Re} G$ (см. Предложение 2.14.1 из [11], стр. 130).

Пусть $R = \operatorname{Im} G$. Тогда $i\partial Q / \partial \bar{z}_\alpha = i\partial(G - iR) / \partial \bar{z}_\alpha = \partial R / \partial \bar{z}_\alpha$. Отсюда и из (10) получаем $F_\alpha = \partial H / \partial \bar{z}_\alpha$ с вещественной функцией $H = P + R$. Теорема доказана.

Применим теперь теорему 2 к унитарно-нелинейной системе (3). Напомним, что \mathbb{R}_n – множество вещественных $(n \times n)$ -матриц.

Предложение 3. Система (3) гамильтонова *iff*

$$A^* = A, \quad B^T = B \in \mathbb{R}_n. \quad (11)$$

При этом функция

$$H(z) = z^* A z + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^n B_{\alpha\beta} |z_\alpha|^2 |z_\beta|^2 \quad (12)$$

является функцией Гамильтона системы (3).

Д о к а з а т е л ь с т в о. Для системы (3) условия гамильтоновости (9) принимают следующий вид:

$$A_{\alpha\beta} - \bar{A}_{\beta\alpha} + (B_{\alpha\beta} - \bar{B}_{\beta\alpha}) z_\alpha \bar{z}_\beta + \delta_{\alpha\beta} \sum_{\gamma=1}^n (B_{\alpha\gamma} - \bar{B}_{\beta\gamma}) |z_\gamma|^2 \equiv 0, \quad (13)$$

$$(B_{\alpha\beta} - B_{\beta\alpha}) z_\alpha z_\beta \equiv 0 \quad (14)$$

– тождественно по $z \in \mathbb{C}^n$ при всех $\alpha, \beta = 1, \dots, n$. Нетрудно убедиться, что эти тождества эквивалентны условиям (11).

Обратно, если выполнены условия (11), то функция (12), очевидно, принимает вещественные значения. Тогда легко проверяется, что $\partial H / \partial z^* = F$ – правая часть системы (3). Предложение доказано.

В силу системы (3) имеет место

$$\frac{\hbar}{2} \dot{N} = z^* D z + \sum_{\alpha, \beta=1}^n (\text{Im} B_{\alpha\beta}) |z_\alpha|^2 |z_\beta|^2, \quad (15)$$

где $D = (A - A^*)/2i$ – эрмитова матрица. Кроме того, след матрицы Якоби системы (3) определяется равенством:

$$\text{Tr} \left(\frac{\partial F}{\partial z} \right) = \text{Tr}(A) + \sum_{\beta=1}^n \left(B_{\beta\beta} + \sum_{\alpha=1}^n B_{\alpha\beta} \right) |z_\beta|^2. \quad (16)$$

С помощью равенств (15), (16) легко доказывается следующее

Предложение 4. Истинны следующие утверждения:

(I) Система (3) закрыта *iff* $A^* = A, (B + B^T) \in \mathbb{R}_n$.

(II) Система (3) консервативна *iff* $\text{Im} \text{Tr}(A) = 0, \text{Im}(B_{\beta\beta} + B_{1\beta} + \dots + B_{n\beta}) = 0$

при $\beta = 1, \dots, n$.

(III) Система (3) диссипативна *iff* $\text{Im} \text{Tr}(A) < 0, \text{Im}(B_{\beta\beta} + B_{1\beta} + \dots + B_{n\beta}) \leq 0$

при $\beta = 1, \dots, n$.

Из ПЗ и П4 вытекает

Следствие 5. В классе унитарно-нелинейных систем вида (3) любая гамильтонова система закрыта. Иными словами, функция $N(z) = z z^*$ постоянна на каждой траектории унитарно-нелинейной гамильтоновой системы.

Условия замкнутости динамического уравнения для матрицы плотности

Предположим теперь, что правые части системы (1), $F = (F_1, \dots, F_n)^T$, определены в поликруге $\Omega = \{z \in \mathbb{C}^n \mid |z_1| < r_1, \dots, |z_n| < r_n\}$ и представлены там степенными рядами вида

$$F_\alpha(z) = \sum_{a,b \in \mathbb{N}^n} F_{\alpha,a,b} z^a z^b, \quad z \in \Omega, \alpha=1, \dots, n, \quad (17)$$

которые абсолютно сходятся в каждой точке $z \in \Omega$. Здесь $r_1 > 0, \dots, r_n > 0$; $N = \{0, 1, 2, \dots\}$; $z = (z_1, \dots, z_n)^T$ при любом $z = (z_1, \dots, z_n)^T \in \mathbb{C}^n$; $z^a = z_1^{a_1} \dots z_n^{a_n}$ при любых $z \in \mathbb{C}^n$, $a \in \mathbb{N}^n$. Мы будем использовать также следующее обозначение:

$$Z^A = \prod_{\alpha, \beta=1}^n Z_{\alpha\beta}^{A_{\alpha\beta}} \quad \text{при } Z = [Z_{\alpha\beta}] \in \mathbb{C}^n, A = [A_{\alpha\beta}] \in \mathbb{N}^n.$$

Заметим, что для любого $z \in \Omega$ соответствующая матрица плотности $\rho = z z^*$ принадлежит поликругу U в пространстве \mathbb{C}^n : $U = \{Z \in \mathbb{C}^n \mid |Z_{\alpha\beta}| < r_\alpha r_\beta \text{ при } \alpha, \beta = 1, \dots, n\}$.

При сделанных предположениях введём следующее

Определение. Будем говорить, что система (1) обладает свойством замкнутости уравнения для матрицы плотности (УМП) *iff* в силу системы (1) истинно равенство

$$i\hbar \rho = G(\rho) \quad \text{при } \rho = z z^*, z \in \Omega \quad (18)$$

для некоторого гладкого отображения $G: U \rightarrow \mathbb{C}^n$, $G = [G_{\alpha\beta}]$.

Теорема 6. Следующие два утверждения равносильны:

(I) Система (1) обладает свойством замкнутости УМП, причём правые части уравнения (18) допускают разложения в степенные ряды

$$G_{\alpha\beta}(Z) = \sum_{A, B \in \mathbb{N}^n} G_{\alpha, \beta, A, B} Z^A Z^B, \quad Z \in U, \alpha, \beta = 1, \dots, n, \quad (19)$$

которые абсолютно сходятся при любом $Z \in U$.

(II) Система (1) относится к классу динамических систем следующего вида:

$$i\hbar z = \Lambda(zz^*)z + f(z)z, \quad z \in \Omega, \quad (20)$$

где $\Lambda: U \rightarrow \mathbb{C}_n$ – голоморфное отображение и $f: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ – функция, представленная степенным рядом

$$f(z) = \sum_{a,b \in \mathbb{N}^n} f_{a,b} z^a z^b, \quad z \in \Omega, \quad (21)$$

который абсолютно сходится в каждой точке $z \in \Omega$.

Доказательство утверждения (I) \rightarrow (II) сводится к решению функционального уравнения

$$\Lambda(zz^*)z + f(z)z = F(z), \quad z \in \Omega, \quad (22)$$

относительно функций $\Lambda(Z), f(z)$, которые разыскиваются в классе абсолютно сходящихся степенных рядов. Обратное утверждение (II) \rightarrow (I) очевидно: в силу системы (20) истинно равенство (18), где

$$G(Z) = \Lambda(Z)Z - Z^* \Lambda^*(Z), \quad Z \in U. \quad (23)$$

Из (23) следует также, что в классе (Λ, f) -систем вида (20) уравнение для матрицы плотности (18) зависит только от Λ и не зависит от f . Поэтому особый интерес представляют системы вида (20) при $f \equiv 0$:

$$i\hbar z = \Lambda(zz^*)z, \quad z \in \Omega. \quad (24)$$

Вместе со свойством замкнутости УМП такие системы наследуют и некоторые другие свойства моделей линейной квантовой механики.

Например, для нелинейных систем вида (24) весьма характерно существование стационарных решений $z(t) = \zeta \exp(-i\omega t)$, где частота $\omega \in \mathbb{R}$ и вектор $\zeta \in \mathbb{C}^n$ постоянны. Отыскание стационарных решений сводится к нелинейной задаче на собственные значения

$$\Lambda(\zeta\zeta^*)\zeta = \hbar\omega\zeta, \quad \omega \in \mathbb{R}, \quad \zeta \in \mathbb{C}^n, \quad (25)$$

аналогичной соответствующей спектральной задаче линейной теории.

Нелинейные системы вида (24) наследуют также фундаментальное свойство моделей линейной квантовой механики – знаменитое соотношение Эйнштейна между энергией и числом квантов возбуждения. В самом деле, введём “энергию” системы (24):

$$E(z) = \operatorname{Re}[z^* \Lambda(zz^*) z], z \in \mathbb{C}^n$$

Тогда, как легко проверить, функции $E(z)$ и $N(z) = z^* z$ постоянны на орбитах стационарных решений и удовлетворяют там соотношению Эйнштейна:

$$E = \hbar \omega N.$$

В заключение заметим, что любая (Λ, f) -модель (20) сводится, в сущности, к $(\Lambda, 0)$ -модели (24). В самом деле, любое решение $z(t)$ системы (20) можно представить в виде $z(t) = \zeta(t) \exp[-i\theta(t)]$, где $\zeta(t)$ – некоторое решение системы (24), а вещественная функция $\theta(t)$ удовлетворяет уравнению $\hbar \dot{\theta} = f(e^{-i\theta} \zeta)$. Таким образом, нелинейные динамические системы вида (24) представляют канонически выделенный класс нелинейных моделей, наследующих фундаментальные свойства конечномерных моделей линейной квантовой механики.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта INTAS 97 – 30804.

Литература.

1. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике (вып. 8, 9). – М.: Мир, 1978, 524 с.
2. Менский М.Б. Явление декогеренции и теория непрерывных квантовых измерений. // УФН, 1998, т. 168, № 9, с. 1017 – 1035.
3. Mahler G., Weberuß V.A. Quantum Networks. Dynamics of Open Nanostructures. – Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1995, 391 p.
4. Kenkre V.M. Nonlinear Dynamics of Polaron. // Polarons and Applications. Ed. by V.D. Lakhno, 1994, J. Wiley, Chichester, p. 383 – 406.
5. Апонин Ю.М., Апонина Е.А. Бифуркации стационарных состояний и сепаратрис в дискретном нелинейном уравнении Шредингера. // Математика. Компьютер. Образование.

- Сборник научных трудов, 2001, т. 8, ч. 2, М.: Прогресс – Традиция, с. 317 – 322.
6. Маслов В.П. Комплексные марковские цепи и континуальный интеграл Фейнмана. – М.: Наука, 1976, 192 с.
 7. Scott A. Davydov's Soliton. // *Physics Reports*, 1992, v. 217, N 1 – 6, p. 1 – 68.
 8. Bang O., Christiansen P.L., Rasmussen K.O., Gaididei Y.B. The role of nonlinearity in modelling energy transfer in Scheibe aggregates. // *Nonlinear Excitations in Biomolecules*, Ed. by M. Peyrard, 1995, Springer, Berlin, p. 317 – 335.
 9. Lakhno V.D. Soliton-like Solutions and Electron Transfer in DNA. // *J. of Biological Physics*, 2000, v. 26, p. 133 – 147.
 10. Lakhno V.D. Oscillations in the primary charge separations in bacterial photosynthesis. // *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2002, v. 4, p. 2246 – 2250.
 11. Нарасимхан Р. Анализ на действительных и комплексных многообразиях. – М.: Мир, 1971, 232 с.
 12. Ганнинг Р. Росси Х. Аналитические функции многих комплексных переменных. – М.: Мир, 1969, 395 с.