

КВАНТОВЫЕ ПРОЯВЛЕНИЯ ДЛЯ КЛАССИЧЕСКОЙ ИНТЕГРИРУЕМОЙ ДВУМЕРНОЙ СИСТЕМЫ С ДВУХЪЯМНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Н.А. Чеканов, Е.В. Шевченко

Белгородский государственный университет,
Студенческая 14, 308007, Белгород, Россия
chekanov@bsu.edu.ru, eug_shev@mail.ru

Для квантовой системы с C_{2v} симметричным гамильтонианом, поверхность потенциальной энергии которого имеет два локальных минимума, решена задача на собственные значения. Построены функция распределения расстояний между соседними уровнями, спектральная жесткость Дайсона, а также узловые линии для некоторых волновых функций. Полученные результаты сопоставлены с теоретическими предсказаниями для регулярных и хаотических классических систем.

Ключевые слова и фразы: детерминированный хаос, спектр, волновые функции, функции распределения расстояний между соседними уровнями энергии, нодальная структура волновых функций.

1. Открытие А. Пуанкаре в конце XVIII века динамического хаоса в классических системах и его интенсивное исследование в последние, примерно, три десятилетия стимулировали также поиски его проявлений в характеристиках соответствующего квантового аналога (см., например, [1-3]).

Как известно, для консервативных гамильтоновых систем с двумя степенями свободы существование классического хаоса связано с отсутствием второго интеграла движения, в случае же интегрируемых систем этот интеграл имеется, и классическое движение является регулярным. В квазиклассическом приближении М. Берри и М. Табором [4] было доказано, что если классическая система является интегрируемой, то функция распределения $p(s)$ расстояний $s = E_{j+1} - E_j$ между соседними значениями спектра $\{E_j\}$ ее квантового аналога имеет пуассоновский вид $p(s) = \exp(-s)$. Для квантовых аналогов классических неинтегрируемых систем по аналогии со статистической теорией сложных систем [5] была выдвинута гипотеза [6], согласно которой функция распределения $p(s)$ расстояний s между соседними уровнями имеет вignerовский вид $p(s) = \pi s / 2 \cdot \exp(-\pi s^2 / 4)$. Как легко видеть, при сближение энергетических уровней $s \rightarrow 0$ для распределения Вигнера $p(s) \rightarrow 0$, а для распределения Пуассона $p(s) \rightarrow 1$, что означает отталкивание уровней в первом случае и кластеризацию уровней во втором.

Что касается более чувствительной квантовой характеристики как волновая функция, то для поиска квантовых проявлений характера классического движения исследуют нодальную картину или, другими словами, узловую структуру волновых функций $\psi(x, y)$, т.е. семейство линий, на которых $\psi(x, y) = 0$. Вполне очевидно, что для сепарабельных, а, значит, и интегрируемых систем эти линии пересекаются, но для неинтегрируемых в классическом пределе систем ожидаются так называемые «избегнутые пересечения» в нодальной картине волновых функций в соответствии с поведением классических траекторий в фазовом пространстве.

Реальная ситуация на самом деле более сложная, так как во многих классических системах даже с двумя степенями свободы, поверхности потенциальной энергии (ППЭ) которых имеют несколько локальных минимумов, при одной и той же энергии

сосуществуют в разных потенциальных ямах два типа движений: хаотическое в одной и регулярное во второй, это так называемые смешанные состояния [7]. Кроме того, во многих системах классический хаос не развивается в полной мере (см., например [8-10]), о чем можно судить по сечениям Пуанкаре, а также может происходить возврат от хаотического движения опять к регулярному, то есть реализуется переход регулярность-хаос-регулярность [11]. Следует отметить, что строгих математических теорем о взаимосвязи характера движения в классической системе (интегрируемая или неинтегрируемая система) и свойствами спектра и волновых функций ее квантового аналога, к сожалению, в настоящее время нет, поэтому основным способом установления этой связи являются прямые и крайне сложные численные или символично-численные вычисления.

В предыдущих работах [8-10] были представлены некоторые результаты для двумерной квантовой C_{2v} симметричной системы, параметры гамильтониана которой выбраны так, что эта система при классическом описании допускала хаотический режим движения. В настоящей работе исследована та же система, но параметры ее гамильтониана таковы, что она при классическом описании является интегрируемой.

2. Рассмотрим классическую систему, описываемую функцией Гамильтона в виде

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + V(x, y), \quad (1a)$$

$$V(x, y) = \frac{a}{2}(x^2 + y^2) - \frac{a'}{2}x^2 + bx^2y^2 + c(x^2 + y^2)^2. \quad (1b)$$

где (p_x, p_y) и (x, y) – канонически сопряженные импульсы и координаты, соответственно, a, a', b, c – параметры; а также квантовый аналог системы (1), оператор Гамильтона \hat{H} которой получается из классического выражения (1) известной заменой: $p_x \rightarrow \hat{p}_x = -i \partial / \partial x$, $p_y \rightarrow \hat{p}_y = -i \partial / \partial y$. Система (1) обладает симметрией точечной группы C_{2v} , которая соответствует группе поворотов и поворотов с отражениями прямоугольника и имеет четыре неприводимых представления: A_1, A_2, B_1, B_2 .

Число особых точек потенциальной функции (1b) зависит от выбора параметров. В данной работе приведено исследование системы (1) с параметрами

$$a = 1,849, \quad a' = 8,257825, \quad b = 0, \quad c = 1, \quad (2)$$

при которых ППЭ (1b) имеет два локальных минимума и одну седловую точку в начале координат. При этом классическое движение является финитным ($c > 0$), а при квантовом рассмотрении спектр является дискретным.

Наличие седловой точки на ППЭ (1b) свидетельствует о присутствии на этой поверхности областей с отрицательной гауссовой кривизной, что указывает на возможность существования классического хаоса в системе (1). Однако, при выборе параметров системы (1) в виде (2) движение является регулярным, так как система (1) имеет, кроме энергии, второй интеграл движения

$$I = (x p_y - y p_x)^2 + a' \left(\frac{p_x^2}{2} + x^4 + x^2 y^2 + \frac{a - a'}{2} x^2 \right). \quad (3)$$

Кроме того, нами найдено, что система (1) является не только интегрируемой, но и сепарабельной в вырожденных эллиптических координатах

$$x = \sqrt{\frac{a'}{2}} c h(u) \cdot \cos(v), \quad y = \sqrt{\frac{a'}{2}} sh(u) \cdot \sin(v), \quad (4)$$

где $u \in [0, \infty)$, $v \in [0, 2\pi)$ и фокусами в точках $(\pm\sqrt{a'/2}, 0)$, в которых функция Гамильтона (1) принимает сепарабельный вид

$$H(p_u, p_v, u, v) = \frac{1}{2}(p_u^2 + p_v^2) + V(ch u) + V(\cos v),$$

где

$$V(t) = \frac{a'}{8}(a'^2 - a'a - 4E)t^2 + \frac{a'^2}{8}(a - 2a'a)t^4 + \frac{a'^3}{8}t^6, \quad t = chu, \cos v.$$

Одним из методов исследования характера классического движения гамильтоновой системы является известный метод сечений Пуанкаре. На рис. 1 показаны сечения Пуанкаре системы (1), построенные для значений энергии вблизи седловой точки и для значений, находящихся в диапазоне вычисленных нами энергетических уровней квантового аналога системы (1). Как видно из рис. 1, пересечения классических траекторий с поверхностью сечения (x, p_x) для любых значений энергии образуют гладкие замкнутые кривые. Таким образом, классические траектории лежат на инвариантных торах, что подтверждает регулярность системы (1).

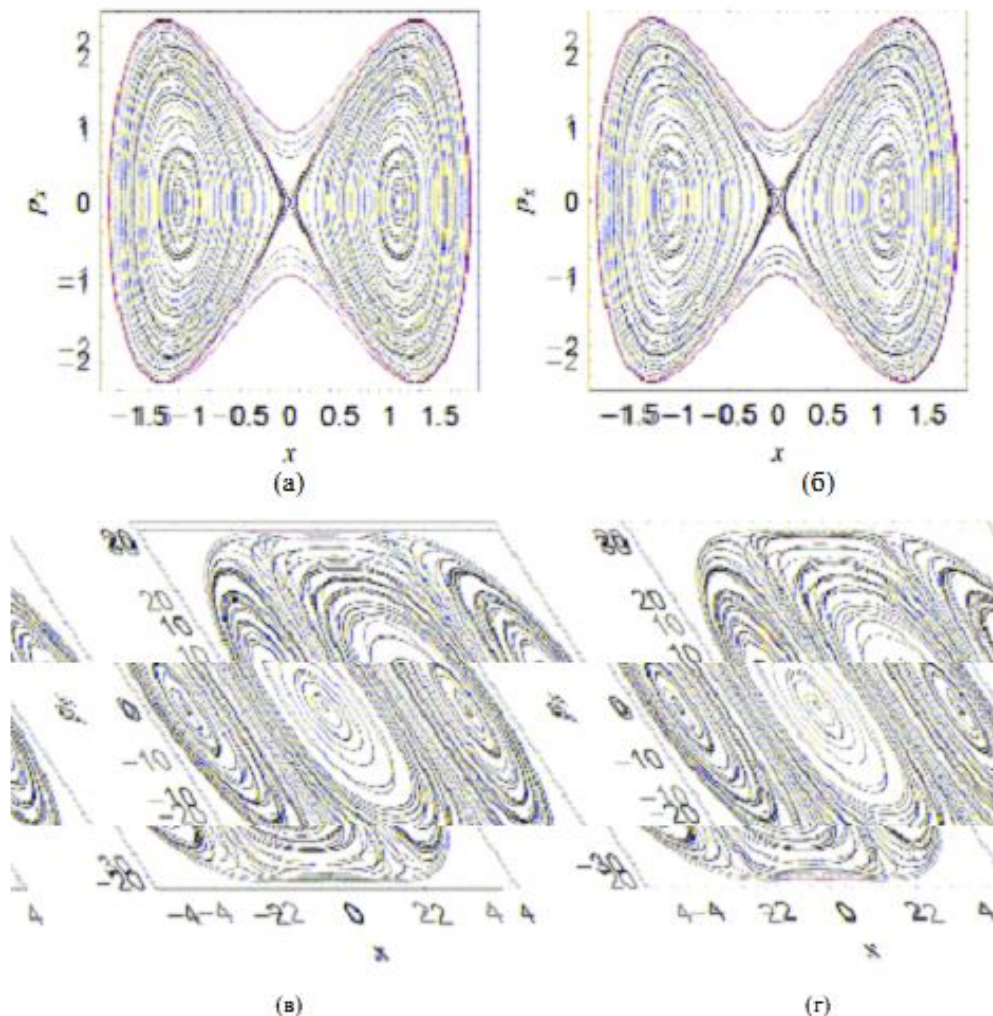


Рис. 1. Сечения Пуанкаре, построенные для системы (1) при значениях энергии: (а) $E=0$, (б) $E=0,5$, (в) $E=200$, (г) $E=530$.

3. Квантовый аналог гамильтониана (1) имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{a}{2} (x^2 + y^2) - \frac{a'}{2} x^2 + bx^2 y^2 + c(x^2 + y^2)^2. \quad (5)$$

Для вычисления спектра и волновых функций требуется решить задачу на собственные значения:

$$\hat{H}(x, y) \psi(x, y) = E \psi(x, y). \quad (6)$$

Собственные состояния гамильтониана (6) были вычислены нами при помощи процедуры диагонализации гамильтоновой матрицы $\langle n'_1, n'_2 | \hat{H} | n_1, n_2 \rangle$, полученной в наборе базисных функций двумерного вырожденного гармонического осциллятора

$$\psi(x, y) = \sqrt{\frac{\omega}{2^{n_1+n_2} n_1! n_2! \pi}} \exp\left\{-\frac{\omega}{2}(x^2 + y^2)\right\} H_{n_1}(x\sqrt{\omega}) H_{n_2}(y\sqrt{\omega}), \quad (7)$$

где $H_n(t)$ – полиномы Чебышева-Эрмита, ω – варьируемый параметр.

Базисные функции для каждого из неприводимых представлений группы C_{2v} определяются значениями квантовых чисел n_1 и n_2 , как показано в табл. 1.

Таблица 1

Классификация базисных функций (7) в соответствии с неприводимыми представлениями группы симметрии C_{2v} .

Тип симметрии	n_1	n_2	n'_1	n'_2
A_1	чет	чет	чет	чет
A_2	нечет	нечет	нечет	нечет
B_1	нечет	чет	нечет	чет
B_2	чет	нечет	чет	нечет

Явный вид матричных элементов гамильтоновой матрицы $\langle n'_1, n'_2 | \hat{H} | n_1, n_2 \rangle$ приведен в работах [8-10]. При численном решении уравнения Шредингера (6) элементы гамильтоновой матрицы были упорядочены по значению главного квантового числа $N = n_1 + n_2$, $N = 0, 1, \dots, N_{\max}$ и было получено 2211 уровней энергии типа A_1 и 2145 уровней энергии для каждого из типов A_2 , B_1 , B_2 . Из них около 40% уровней каждого типа вычислены с погрешностью $\Delta < 0,1 \cdot s_{\min}$, где s_{\min} – минимальное расстояние между соседними энергетическими уровнями в рассматриваемом диапазоне энергий $V_{\min} \approx -2,567 < E < 530$, которые были приняты для дальнейшего построения функций распределения $p(s)$.

4. Согласно гипотезе об универсальном поведении флуктуаций энергетических спектров [6], распределение расстояний между соседними энергетическими уровнями и спектральная жесткость Дайсона $\Delta_3(L)$ описываются теоретическими кривыми, различными для регулярных и хаотических систем.

Для анализа статистических свойств энергетического спектра был использован нормализованный спектр, полученный из исходного при помощи процедуры «развертки» [12], а статистика Дайсона $\Delta_3(L)$ вычислена нами при помощи процедуры, описанной в [6,13].

В результате получены подобные результаты для функции $p(s)$ и жесткости $\Delta_3(L)$ для всех типов симметрии исследуемой задачи. На рис. 2 изображены спектральные характеристики, полученные для типов A_1 и B_1 . Сплошной линией обозначены теоретические предсказания для регулярных систем, а пунктирной – для хаотических систем, свойства флуктуирующей составляющей спектра которых описываются гауссовым ортогональным ансамблем матриц со случайными элементами.

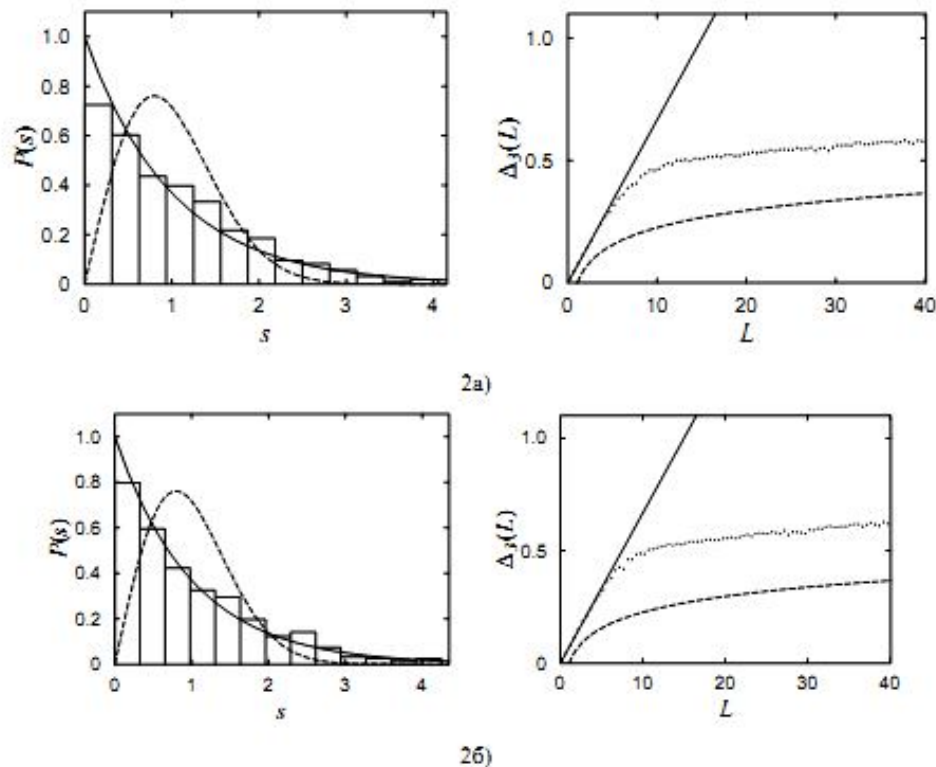


Рис. 2. Распределение расстояний между соседними энергетическими уровнями (слева) и спектральная жесткость Дайсона (справа) для уровней типа A_1 (2а), B_1 (2б).

Проведенный анализ при квантово-механическом рассмотрении показал хорошее согласие статистических свойств спектра уравнения Шредингера (6) с а priori предсказаниями: распределение $p(s)$ хорошо описывается распределением Пуассона, а значения статистики Дайсона $\Delta_3(L)$ лежат на прямой $L/15$ до некоторого значения при $L_{\max} \geq 0$, после чего происходит насыщение статистики $\Delta_3(L)$ в соответствии с квазиклассической теорией [14].

5. Методом диагонализации были вычислены также волновые функции уравнения Шредингера (6) и для некоторых уровней энергии была исследована узловая структура или нодальная картина ($\psi(x, y) = 0$) соответствующей волновой функции.

Узловая структура волновых функций всех типов подобна изображенным на рис. 4 для состояний A_1 - и A_2 -типов. Видно, что нодальные линии расположены вдоль координатных эллиптических координат (4) (см. рис. 3): $u = \text{const}$ и $v = \text{const}$.

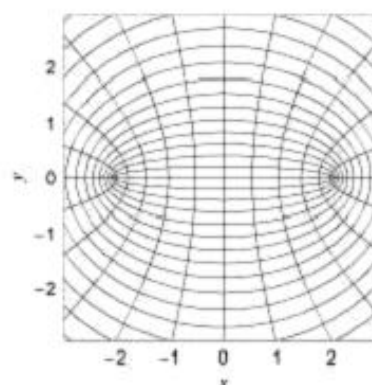


Рис. 3. Координатные линии (софокусные эллипсы и гиперболы) переменных (4)

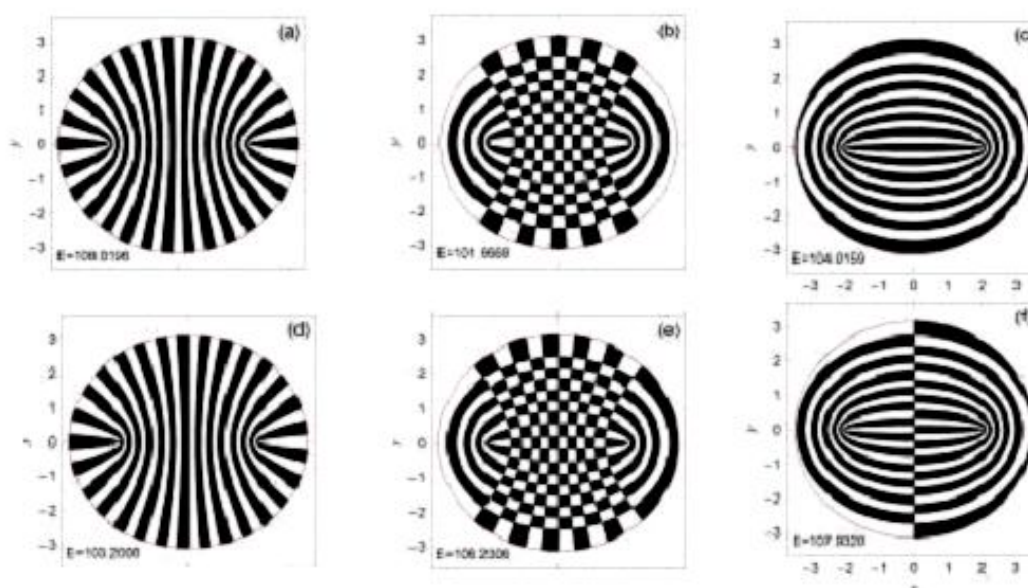


Рис. 4. Структура волновых функций уравнения Шредингера (6) для состояний A_1 -типа (a, b, c) и состояний A_2 -типа (d, e, f).

Темные и светлые области отвечают разным знакам волновых функций

6. Таким образом, для рассмотренной системы численно вычисленные квантовые характеристики: функции распределения $p(s)$, спектральная жесткость Дайсона $\Delta_3(L)$ и нодальная картина $\psi(x, y) = 0$ полностью подтверждают их эвристические предсказания, если эта система является интегрируемой и сепарабельной при классическом описании.

Литература

1. Gutzwiller M. C. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. New York: Springer, 1990. – 432 p.
2. М. Табор. Хаос и интегрируемость в нелинейной динамике. – М.: Эдиториал УРСС, 2001. – 318 с.
3. Штокман Х.-Ю. Квантовый хаос. – М.: Физматлит, 2004. – 374 с.
4. Berry M., Tabor M. Level clustering in the regular spectrum// *Proc. R. Soc. Lond.*, v.A365. – 1977. – p.375-394.
5. Дайсон Ф. Статистическая теория энергетических уровней сложных систем. М.: ИЛ. – 1963. – 124с.
6. Bohigas O., Giannoni M.J. *Chaotic motion and random-matrix theory*. Lecture Notes in Physics. – New-York Springer-Verlag: v. 209. – 1984. – p. 1871-1969.
7. Болотин Ю.Л., Гончар В.Ю., Тарасов В.Н., Инопин Е.В., Чеканов Н.А. Стохастическая ядерная динамика// *Физика элем. частиц и атом. ядра*. Т.20, вып.4. – 1989. – с.878-929.



8. Чеканов Н.А., Шевченко Е.В. Статистические свойства спектра и волновых функций двумерного C_{2v} симметричного гамильтониана // Научные ведомости БелГУ, сер.: физико-математические науки, №6(37), вып.13. –2007. – с.116-124.
9. Чеканов Н.А., Шевченко Е.В. Флуктуации спектра и узловая структура собственных функций некоторых двумерных квантовых систем: численное моделирование// Первая международная конференция "Математическое моделирование и дифференциальные уравнения", ред. В.И. Коржук, С.В. Лемешевский, Е.С. Чуб. Институт математики НАН Беларуси, Минск, 2007. с.61-63.
10. Чеканов Н.А., Шевченко Е.В. Свойства спектра и волновых функций двумерного C_{2v} -симметричного гамильтониана// Вестник ВорГТУ, т. 4, № 7. – 2008. – с.18-21.
11. Bolotin Yu.L., Gonchar V.Yu., Tarasov V.N., Chekanov N.A. The transition regularity-chaos-regularity and statistical properties of wave function. Phys. Lett., 1990. – v. A144, n. 8, 9. – p. 459-461.
12. T.A. Brody et.al. Random-matrix physics: spectrum and strength fluctuations// Rev. of Mod. Phys. – v.53.No.3. – 1981. – p.385-479.
13. Berry M.V. Classical Chaos and Quantum Eigenvalues. Order and Chaos in nonlinear physical systems (ed. S. Lundquist, N. March and M. Tosti). – New York and London: Plenum Press, 1988. – p. 340-348.
14. Berry M.V. Semiclassical theory of spectral rigidity. Proc. R. Soc. – 1985, v. A400. – p. 229-251.

QUANTUM MANIFESTATION FOR THE CLASSICAL INTEGRABLE TWO-DIMENSIONAL SYSTEM WITH DOUBLE-WELL POTENTIAL

N.A. Chekanov and E.V. Shevchenko

Belgorod State University,
308007, Belgorod, Studencheskaj Str., 14, Russia
chekanov@bsu.edu.ru, eug_shev@mail.ru

For the quantum system with the C_{2v} symmetric Hamiltonian those potential surface energy has two local minima the eigen problem is solved. The distribution function of spacing between the nearest-neighbor energy levels, the Dyson's spectral rigidity and the nodal picture for some wave function are constructed. Results obtained are compared with theoretical predictions for the regular and chaotic classical systems.

Key words and phrases: deterministic chaos, spectrum, wave functions, distribution function of spacing between the nearest-neighbor energy levels, nodal picture of the wave functions.