

КЛАССИЧЕСКАЯ И КВАНТОВАЯ ДВУМЕРНЫЕ МОДЕЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ С ПЯТИЧЛЕННЫМ ПОЛИНОМИАЛЬНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

А. Н. Лукьяненко, Н. А. Чеканов

Белгородский государственный университет

Рассмотрены классическая и квантовая $C4v$ симметричные двумерные модельные системы с пятичленным полиномиальным потенциалом. В классическом пределе построены сечения Пуанкаре и показано существование перехода регулярность–хаос–регулярность. В классической системе показано наличие смешанных состояний, т. е. сосуществование регулярных и хаотических режимов движения при фиксированной энергии. Для квантовой системы с помощью разработанной символьно-численной MAPLE программы на основе метода самосогласованного базиса вычислены нижние уровни энергии.

Введение

Точные, т. е. решения в явном аналитическом виде для уравнения Шредингера даже в одномерном случае найдены для небольшого класса потенциалов [1]. Для решения задач на собственные значения, в частности стационарного уравнения Шредингера, разработано достаточно большое число различных методов (см., например [2, 3]).

Вычислительные трудности сильно возрастают при увеличении размерности рассматриваемой системы и усложнении вида дифференциального оператора Шредингера, для которого решается задача на собственные значения. Кроме того, точность вычислений спектра и волновых функций ухудшается, если квантовая система допускает существование динамического хаоса в классическом пределе [4, 5].

Так как вычисления всегда ограничены возможностями даже современных быстродействующих компьютеров, а универсального метода не существует, то приходится искать наиболее оптимальные вычислительные методы для решения конкретных задач. Перспективным современным подходом представляются комбинированные или символьно-численные методы, которые сочетают аналитические преобразования с последующим численным решением исходной задачи с использованием современных компьютерных систем.

В работах [6, 7] методом самосогласованного базиса [8] было решено двумерное уравнение Шредингера для полиномиального гамильтониана, описывающего квадрупольные поверхностные колебания, например, атомного ядра. Параметры этого гамильтониана выбра-

ны были так, что его потенциальная функция имела единственный минимум. В работе [9] этим методом были найдены спектр и волновые функции оператора Шредингера с двухъямным потенциалом, который используется, например, в молекулярной физике [10, 11].

Как известно [8], при решении двумерного уравнения Шредингера методом самосогласованного базиса вначале решается задача Коши, в которую энергия входит как параметр, и строится общее решение, из которого выбирается решение, удовлетворяющее граничным условиям. Это решение существует только для определенных собственных значений, составляющих дискретный спектр, и соответствующих собственных функций.

В настоящей работе рассматривается двумерный гамильтониан, параметры которого таковы, что его потенциальная функция

$$V(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + bx^2y^2 - c(x^2 + y^2)^2 + dx^2y^2(x^2 + y^2) + e(x^2 + y^2)^3 \quad (1)$$

имеет пять локальных минимумов и четыре седловых точки (см. рис. 1).

Отличительной чертой систем с несколькими минимумами является существование различных типов классической динамики (регулярной или хаотической) в разных потенциальных ямах при одной и той же энергии.

Рассматриваемый гамильтониан используется, например, в молекулярной [10, 11] физике, квантовой химии [12]. С помощью разработанной символьно-численной программы SELFA_C4V в среде MAPLE для этого гамильтониана методом самосогласованного

базиса получены системы дифференциальных уравнений, найдены численные решения этих систем и вычислены нижайшие уровни энергий.

Классическая система

Динамика классической системы описывается следующей функцией Гамильтона:

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

где $V(x, y)$ – потенциальная функция (1); x, y, p_x, p_y – канонически сопряженные координаты и импульсы; b, c, d, e – параметры.

На рис. 1 изображены изолинии потенциальной функции (1) вместе с линиями нулевой гауссовой кривизны.

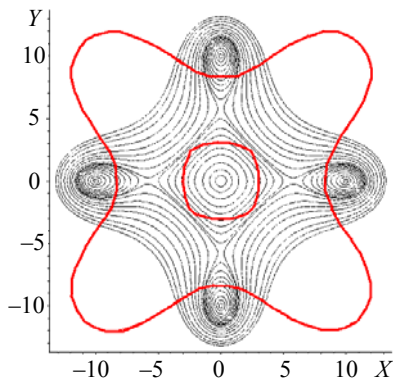


Рис. 1. Изолинии ППЭ (2) и линия (жирная) нулевой гауссовой кривизны

В общем случае рассматриваемая система является неинтегрируемой и в ней реализуются как регулярные,

так и хаотические режимы движения. Критические энергии перехода от одного типа движения к другому можно вычислить согласно критерию Тоды [13].

При проведении численных расчетов значения параметров были следующие: $b = 0,05$; $c = 0,01$; $d = 0,0001$; $e = 0,00005$, при которых значения потенциальной функции $V(x, y)$ во всех пяти минимумах равны нулю. Согласно критерию Тоды критическая энергия перехода от регулярного режима движения к хаотическому равна $E_{cr1} = 3,8740$. А критическая энергия восстановления регулярного движения оценивается максимальным значением $V(x, y)$ на линии нулевой гауссовой кривизны.

При разных энергиях E нами были вычислены сечения Пуанкаре в соответствии с определением, данным в работах [14, 15]. Сечения Пуанкаре для нашей системы представлены на рис. 2–4. Так как при заданной энергии фазовые траектории исследуемой классической системы лежат в трехмерной области, например (x, y, p_y) , то совокупность последовательных точек пересечения ими (при определенном знаке p_y) плоскости $x = 0$ составляют сечение Пуанкаре в двух переменных (y, p_y) . Если точки (y, p_y) будут распределены случайным образом на этой плоскости в допустимой законом сохранения энергии двумерной области, то такая траектория называется хаотической, но если эти точки (y, p_y) образуют замкнутые (одну или несколько) кривые, то траектории являются регулярными. Некоторые фазовые траектории могут пересекать выбранную плоскость $x = 0$ в одной и той же точке (или в одной, или в нескольких точках), такие траектории являются периодическими.

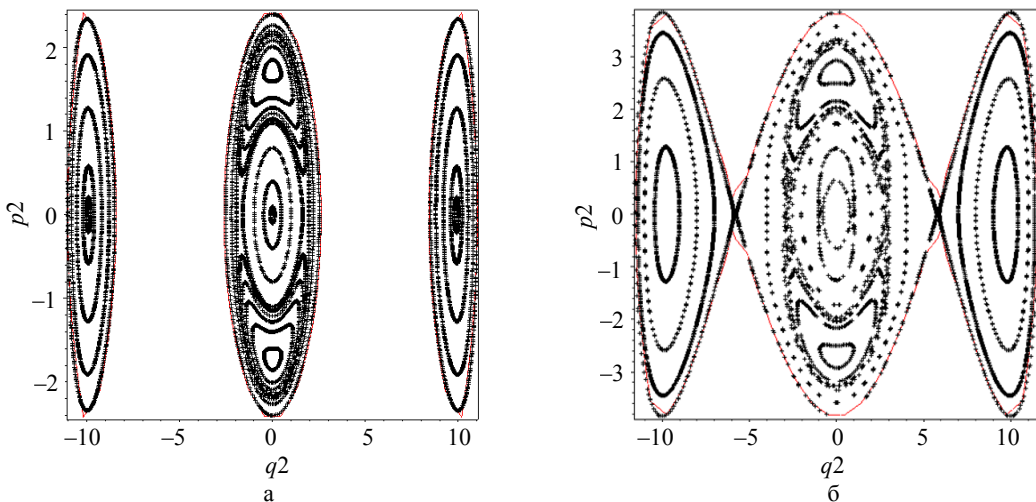


Рис. 2. Сечения Пуанкаре для классического гамильтониана (1)– (2) при энергии: а – $E = 3$; б – $E = 7$

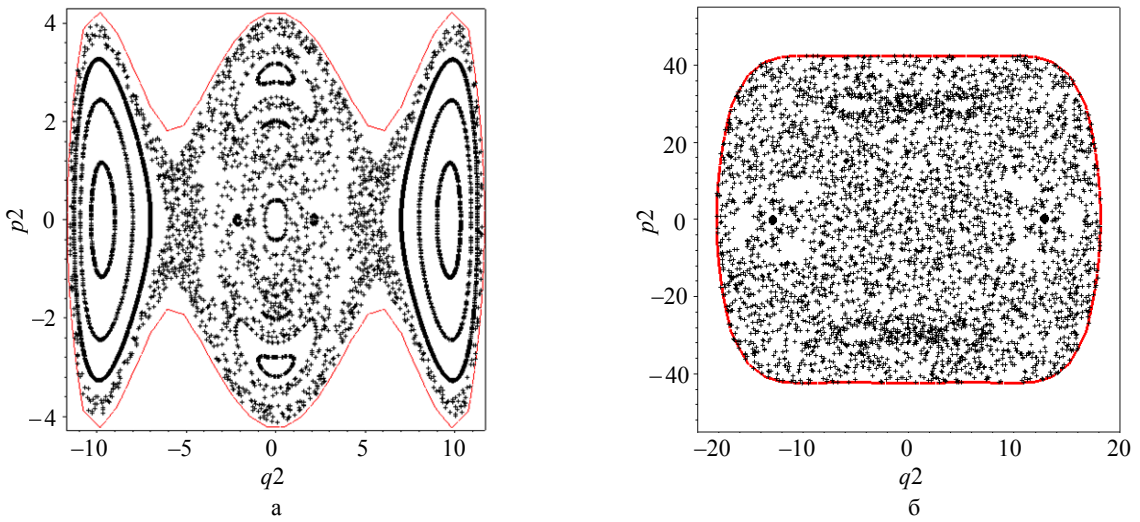


Рис. 3. Сечения Пуанкаре для классического гамильтониана (1)–(2) при энергии: а – $E = 9$; б – $E = 900$

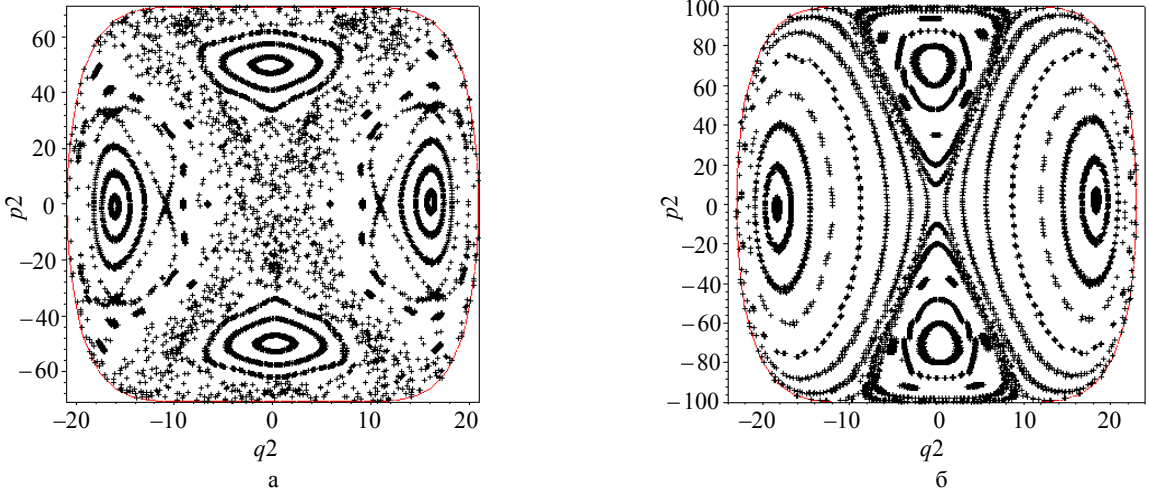


Рис. 4. Сечения Пуанкаре для классического гамильтониана (1)–(2) при энергии: а – $E = 2500$; б – $E = 5000$

Как видно из рис. 3,а, в рассматриваемой системе при одной и той же энергии в разных потенциальных ямах сосуществуют два различных типа движения: хаотическое в центральном минимуме и регулярное в периферийных потенциальных ямах при $E > E_{cr1}$. Но при энергиях выше потенциальной энергии в седловых точках в системе происходит переход от регулярного движения к хаотическому и в периферийных минимумах (см. рис. 3,б). Рис. 4,б показывает, что при достаточно больших энергиях происходит восстановление регулярного характера движения, т. е. в рассматриваемой системе действительно имеет место переход регулярность–хаос–регулярность.

Квантовая система

Квантовым аналогом функции Гамильтона (1)–(2) является оператор Гамильтона

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y), \quad (3)$$

для которого надо решить задачу на собственные значения

$$\hat{H} \psi(x, y) = E \psi(x, y), \quad (4)$$

где E – собственные значения; $\psi(x, y)$ – собственные функции, квадратично интегрируемые на интервале $(-\infty, \infty)$. Уравнение Шредингера (4) запишем в полярных переменных (r, φ)

$$\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{4r^2} \right) + V(r \sin \varphi, r \cos \varphi) - E \right] u(r, \varphi) = 0, \quad (5)$$

где $\psi(r, \varphi) = u(r, \varphi) / \sqrt{r}$ и его решение ищем в виде тригонометрического ряда

$$u(r, \varphi) = \frac{A_0(r)}{2} + \sum_{l=1} [A_l(r) \cos l\varphi + B_l(r) \sin l\varphi], \quad (6)$$

коэффициенты которого являются функциями от радиальной переменной r .

Поиск решений в виде тригонометрических рядов автоматически учитывает граничные условия по угловой переменной. Граничные условия по радиальной переменной учитываются при решении алгебраического уравнения (14).

Разложение (6) подставляем в (5) и в результате получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка

$$\begin{cases} A_1 - \text{mun} \\ A_0'' + \alpha_0 A_0 + \beta A_4 + \gamma(A_4 - A_0) - \delta A_0 = 0; \\ A_4'' + \alpha_4 A_4 + \beta(A_0 + A_8) + \gamma(A_0 - A_8) - (\delta + 2\gamma) A_4 = 0; \\ A_8'' + \alpha_8 A_8 + (\beta + \gamma)(A_4 + A_{12}) - (\delta + 2\gamma) A_8 = 0; \\ \dots \\ A_l'' + \alpha_l A_l + (\beta + \gamma)(A_{l-4} + A_{l+4}) - (\delta + 2\gamma) A_l = 0; \\ l = 0, 4, 8, 12, \dots \end{cases} \quad (7)$$

$$\begin{cases} A_2 - \text{mun} \\ B_4'' + \alpha_4 B_4 + \beta B_8 + \gamma B_8 - (\delta + 2\gamma) B_4 = 0; \\ B_8'' + \alpha_8 B_8 + (\beta + \gamma)(B_4 + B_{12}) - (\delta + 2\gamma) B_8 = 0; \\ B_{12}'' + \alpha_{12} B_{12} + (\beta + \gamma)(B_8 + B_{16}) - (\delta + 2\gamma) B_{12} = 0; \\ \dots \\ B_l'' + \alpha_l B_l + (\beta + \gamma)(B_{l-4} + B_{l+4}) - (\delta + 2\gamma) B_l = 0; \\ l = 4, 8, 12, \dots \end{cases} \quad (8)$$

$$\begin{cases} B_1 - \text{mun} \\ A_2'' + \alpha_2 A_2 + \beta A_6 + \gamma(A_6 - A_2) - \delta A_2 = 0; \\ A_6'' + \alpha_6 A_6 + (\beta + \gamma)(A_2 + A_{10}) - (\delta + 2\gamma) A_6 = 0; \\ A_{10}'' + \alpha_{10} A_{10} + (\beta + \gamma)(A_6 + A_{14}) - (\delta + 2\gamma) A_{10} = 0; \\ \dots \\ A_l'' + \alpha_l A_l + (\beta + \gamma)(A_{l-4} + A_{l+4}) - (\delta + 2\gamma) A_l = 0; \\ l = 2, 6, 10, 14, \dots \end{cases} \quad (9)$$

$$\begin{cases} B_2 - \text{mun} \\ B_2'' + \alpha_2 B_2 + \beta B_6 + \gamma B_6 - \delta B_2 = 0; \\ B_6'' + \alpha_6 B_6 + (\beta + \gamma)(B_2 + B_{10}) - (\delta + 2\gamma) B_6 = 0; \\ B_{10}'' + \alpha_{10} B_{10} + (\beta + \gamma)(B_6 + B_{14}) - (\delta + 2\gamma) B_{10} = 0; \\ \dots \\ B_l'' + \alpha_l B_l + (\beta + \gamma)(B_{l-4} + B_{l+4}) - (\delta + 2\gamma) B_l = 0; \\ l = 2, 6, 10, 14, \dots \end{cases} \quad (10)$$

$$\begin{cases} E_1 - \text{mun} \\ A_1'' + \alpha_1 A_1 + (\beta + \gamma)(A_3 + A_5) - (\delta + 2\gamma) A_1 = 0; \\ A_3'' + \alpha_3 A_3 + (\beta + \gamma)(A_1 + A_7) - (\delta + 2\gamma) A_3 = 0; \\ A_5'' + \alpha_5 A_5 + (\beta + \gamma)(A_1 + A_9) - (\delta + 2\gamma) A_5 = 0; \\ A_7'' + \alpha_7 A_7 + (\beta + \gamma)(A_3 + A_{11}) - (\delta + 2\gamma) A_7 = 0; \\ \dots \\ A_l'' + \alpha_l A_l + (\beta + \gamma)(A_{l-4} + A_{l+4}) - (\delta + 2\gamma) A_l = 0; \\ l = 1, 3, 5, 7, \dots \end{cases} \quad (11)$$

$$\begin{cases} E_2 - \text{mun} \\ B_1'' + \alpha_1 B_1 + \beta(B_5 - B_3) + \gamma(B_3 + B_5) - (\delta + 2\gamma) B_1 = 0; \\ B_3'' + \alpha_3 B_3 + \beta(B_7 - B_1) + \gamma(B_1 + B_7) - (\delta + 2\gamma) B_3 = 0; \\ B_5'' + \alpha_5 B_5 + (\beta + \gamma)(B_1 + B_9) - (\delta + 2\gamma) B_5 = 0; \\ B_7'' + \alpha_7 B_7 + (\beta + \gamma)(B_3 + B_{11}) - (\delta + 2\gamma) B_7 = 0; \\ \dots \\ B_l'' + \alpha_l B_l + (\beta + \gamma)(B_{l-4} + B_{l+4}) - (\delta + 2\gamma) B_l = 0, \\ l = 1, 3, 5, 7, \dots \end{cases} \quad (12)$$

где $\alpha_l(r) = 2E - r^2 - \left(\frac{b}{4} - 2c\right)r^4 + \frac{1-4l^2}{4r^2}$; $\beta = \frac{b}{8}r^4$;
 $\gamma = \frac{1}{8}r^6 d$; $\delta = 2er^6$.

Системы уравнений (7)–(12) с помощью замены

$$A_{4j} = z_{2j+1}, \quad A_{4j}' = z_{2j+2}, \quad B_{4j+4} = z_{2j+1},$$

$$B_{4j+4}' = z_{2j+2}, \quad A_{4j+2} = z_{2j+1}, \quad A_{4j+2}' = z_{2j+2},$$

$$B_{4j+2} = z_{2j+1}, \quad B_{4j+2}' = z_{2j+2}, \quad A_{2j+1} = z_{2j+1},$$

$$A_{2j+1}' = z_{2j+2}, \quad B_{2j+1} = z_{2j+1}, \quad B_{2j+1}' = z_{2j+2}$$

(для системы $A_1, A_2, B_1, B_2, E_1, E_2$ -типов соответственно) эквивалентным и стандартным способом можно переписать в виде систем дифференциальных уравнений первого порядка, введя новые неизвестные функции $z_k(r)$.

Усекая каждую из полученных систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка до $2N$ уравнений, получим конечные и однородные системы дифференциальных уравнений первого порядка относительно неизвестных функций $z_k(r)$, причем функции $\alpha_l(r, E)$ содержат еще произвольные значения энергии E .

С использованием стандартных методов (метод Рунге–Кутты) пакета компьютерной алгебры MAPLE для конкретного значения E численно решаем задачу Коши для каждой из систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка с $2N$ начальными условиями, заданными в виде столбцов диагональной матрицы

$$M_{init} = \text{diag}(z_1(r_0, E), z_1'(r_0, E), z_2(r_0, E), z_2'(r_0, E), \dots, z_N(r_0, E), z_N'(r_0, E)), \quad (13)$$

где $r_0 \rightarrow 0$ – начальная точка интегрирования, и найдем фундаментальную систему решений $z_k^{(j)}(r, E)$ ($k, j = 1, 2, 3, \dots, 2N$), верхний индекс j нумерует решения задачи Коши. Тогда, как известно, общее решение системы дифференциальных уравнений первого порядка определяется линейными комбинациями

Заключение

В работе исследован характер классического движения двумерной гамильтоновой системы, потенциальная функция которой имеет пять локальных минимумов. При помощи сечений Пуанкаре [14] показано, что в этой системе существуют так называемые смешанные состояния и наблюдается переход регулярность–хаос–регулярность.

Для квантового аналога этой системы с помощью разработанной символьно-численной программы в среде MAPLE решено двумерное уравнение Шредингера и проведен численный расчет нижней части энергетического спектра.

Список литературы

1. Миллер У., мл. Симметрия и разделение переменных / Под ред. К. И. Бабенко. Пер. с англ. М.: Мир, 1981.

2. Уилкинсон Дж., Райнш К. Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра. М.: Машиностроение, 1976.

3. Турбинер А. В. Задачи о спектре в квантовой механике и процедура "нелинеаризации" // УФН. 1984. Т. 144. Вып. 1. С. 35–78.

4. 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. Vol. A144, No. 8, 9. P. 459–461.

5. Болотин Ю. Л., Гончар В. Ю., Инопин Е. В. и др. Стохастическая ядерная динамика // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 1989. Т. 20. Вып. 4. С. 878–929.

6. Беляева И. Н., Уколов Ю. А., Чеканов Н. А. Вычисление энергетического спектра и волновых функций обобщенного гамильтониана Хенона–Хейлеса

методом самосогласованного базиса // Вестник Херсонского государственного технического университета. 2005. Вып. 2(22). С. 43–47.

7. Уколов Ю. А., Чеканов Н. А. Численное решение стационарного уравнения Шредингера в приближении самосогласованного базиса // Тезисы VIII Международного семинара «Супервычисления и математическое моделирование». Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2004. С. 100–101.

8. Веницкий С. И., Инопин Е. В., Чеканов Н. А. Решение двумерного уравнения Шредингера в самосогласованном базисе: Препринт ОИЯИ, Р4-93-150. Дубна, 1993.

9. Belajva I. N., Chekanov N. A., Gusev A. A., Lukianenko A. N., Rostovtsev V. A., Vinitsky S. I. Symbolic-numeric Solution of the the Two-dimensional Schroedinger Equation with Double-well Potential // Computer Algebra and Differential Equations Acta Academiae Aboensis. 2007. Ser. B. Vol. 67, No. 2. P. 78–86.

10. Герцберг Г. Спектры и строение простых свободных радикалов. М.: Мир, 1974.

11. Герцберг Г. Спектры и строение двухатомных молекул. М.: Изд-во иностр. лит., 1949.

12. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001.

13. Toda M. Instability of trajectories of lattice with cubic nonlinearity // Phys. Lett. 1974. Vol. 48. P. 335–336.

14. Henon M., Heiles C. The applicability of the third integral of motion: some numerical experiments // Astron. J. 1964. Vol. 69. P. 73–79.

15. Табор М. Хаос и интегрируемость в нелинейной динамике. М.: УРСС, 2001.

Статья поступила в редакцию 07.09.2009