

УДК 530.14

ПРОЯВЛЕНИЯ КВАНТОВОГО ХАОСА В КВАДРУПОЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ ОСЦИЛЛЯЦИЯХ ЯДЕР

В.П. Березовой, Ю.Л. Болотин, В.А. Черкасский

*Институт теоретической физики имени А.И. Ахиезера
Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»
ул. Академическая 1, Харьков, 61108, Украина
E-mail: cherkaskiy@kipt.kharkov.ua
Поступила в редакцию 24 июня 2004г.*

Квадрупольные поверхностные осцилляции атомных ядер в модели жидкой капли представляют парадигму для квантового хаоса. В зависимости от параметров ядра, соответствующий потенциал может иметь как один, так и несколько локальных минимумов. В последнем случае наблюдается смешанное состояние, которое является случаем общего положения в многомерных двумерных потенциалах. Мы исследуем квантовые проявления классической стохастичности в статистике энергетических уровней, структуре волновых функций и динамике волновых пакетов в смешанном состоянии.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: квантовый хаос, смешанное состояние, спектральный метод, квадрупольные осцилляции ядер

Под квантовыми проявлениями классической стохастичности (КПКС) (синонимом этого понятия является термин «квантовый хаос») принято понимать особенности поведения квантовых систем, чьи классические аналоги демонстрируют хаотическое поведение [1-3]. Эти особенности наиболее отчетливо проявляются в статистических свойствах функции распределения расстояний между соседними уровнями энергии [4], в структуре нодальных линий стационарных волновых функций [5] и динамике волновых пакетов [6]. Вплоть до настоящего времени КПКС изучались преимущественно для систем типа бильярдов [7,8]. Для гамильтоновых систем с ненулевой потенциальной энергией КПКС изучались либо для одномерных систем с зависящей от времени внешней силой [9], либо для двумерных поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) простой геометрии [10,11]. До сих пор практически ничего не известно о КПКС для гамильтоновых систем общего вида, включая многомерные потенциалы общего положения, хотя именно с помощью этих потенциалов могут быть описаны основные особенности динамики перехода между различными состояниями, например, изомерные переходы [12] и распад супердеформированных состояний ядер [13]. Важной особенностью таких систем является возможность существования в них так называемого смешанного состояния: различные (регулярные либо хаотические) классические динамические режимы сосуществуют при одной и той же энергии, будучи локализованы в различных локальных минимумах потенциала [14]. Цель настоящей работы состоит в том, чтобы показать перспективность исследований квантового хаоса в многомерных потенциалах, допускающих смешанное состояние. Более того, для некоторых целей исследование квантового хаоса в смешанном состоянии представляется оптимальным. Так, например, обычная процедура поиска КПКС в свойствах стационарных волновых функций означает исследование различий в их структуре ниже и выше классической энергии перехода к хаосу (или других параметров перехода регулярность-хаос). Такой подход наталкивается на трудности, связанные с необходимостью отделить КПКС от модификаций структуры волновых функций, сопровождающих тривиальное изменение квантовых чисел. Квантовые волновые функции, соответствующие энергиям, при которых наблюдается классическое смешанное состояние, позволяют наблюдать КПКС при сравнении не различных волновых функций, а разных частей одной и той же волновой функции, расположенных в различных областях конфигурационного пространства (различные локальные минимумы). Участки спектров многомерных потенциалов, соответствующие интервалам энергий, в которых реализуется смешанное состояние, открывают новые возможности для изучения промежуточной статистики типа Берри-Робника-Богомольного [15,16]. Они особенно интересны с точки зрения проверки недавно предложенных [17] универсальных распределений расстояний между соседними уровнями, учитывающими эффект динамического туннелирования [18] и приводящие к модификации традиционных распределений на малых расстояниях. Наличие смешанного состояния должно существенно отразиться и на динамике волновых пакетов. При этом при энергиях, ниже потенциального барьера, разделяющего соседние минимумы, должна наблюдаться модификация «обычного» потенциального туннелирования, а при энергиях выше барьера — чисто динамическое туннелирование.

Предлагаемая работа представляет одну из первых попыток изучения КПКС в смешанном состоянии (часть предварительных результатов была опубликована в работах [19,20]). Этот пробел связан с тем, что вычисление энергетического спектра для систем с многомерными ППЭ требует соответствующих численных методов. Метод диагонализации обычно используется для гамильтонианов, собственные функции которых не слишком сильно отличаются от базисных функций. Однако эта численная процедура становится менее привлекательной (или даже совершенно неэффективной) при переходе к ППЭ сложной топологии (многомерные потенциалы). В этом случае альтернативой методу диагонализации может стать спектральный метод [21].

Этот метод основан на спектральных свойствах решений зависящего от времени уравнения Шредингера. Метод требует вычисления корреляционной функции вида $P(t) = \langle \psi(r, 0) | \psi(r, t) \rangle$ по численному решению $\psi(r, t)$. Фурье-образ этой корреляционной функции представляет собой набор резонансных пиков, соответствующих стационарным состояниям изучаемой системы. Дополнительное преобразование Фурье $\psi(r, t)$ по времени позволяет найти собственные волновые функции.

В настоящей работе спектральный метод будет использоваться для обнаружения КПКС в поверхностных квадрупольных осцилляциях ядер.

СМЕШАННОЕ СОСТОЯНИЕ

Сосуществование различных динамических режимов (регулярных и хаотических) в различных локальных минимумах – общее свойство гамильтонианов с нетривиальной ППЭ. Понимая под стохастизацией процесс возникновения в системе статистических свойств, вследствие локальной неустойчивости, мы получаем заманчивую возможность отождествления значений параметров, при которых в системе возникает локальная неустойчивость с границей перехода к хаосу. Выбор различных критериев локальной неустойчивости приводит к различным критериям стохастичности. Несмотря на то, что в целом ряде случаев критерии стохастичности правильно предсказывают критическую энергию перехода к хаосу, не следует забывать, что мы имеем дело не со строгими критериями, а лишь со слабым признаком потери устойчивости определенного типа регулярного движения, которая, вообще говоря, не обязательно приводит к хаосу. Сложность ситуации хорошо иллюстрирует динамика финитного движения в потенциалах с несколькими локальными минимумами. Более богатая, по сравнению с потенциалами, имеющими единственный минимум, ППЭ допускает существование нескольких критических энергий даже для фиксированного набора параметров потенциала. Это обстоятельство приводит к существованию для таких потенциалов смешанного состояния: при одной и той же энергии в различных минимумах реализуются различные динамические режимы. Рассмотрим несколько примеров.

Используя только трансформационные свойства взаимодействия, можно показать [22], что потенциал квадрупольных осцилляций (КО) имеет вид

$$U_{QO}(a_0, a_2) = \sum_{m,n} C_{mn} (a_0^2 + 2a_2^2)^m a_0^n (6a_2^2 - a_0^2)^n, \quad (1)$$

где a_0 и a_2 — внутренние координаты поверхности ядра при КО

$$R(\theta, \varphi) = R_0 \{1 + a_0 Y_{2,0}(\theta, \varphi) + a_2 [Y_{2,2}(\theta, \varphi) + Y_{2,-2}(\theta, \varphi)]\}. \quad (2)$$

Поскольку при выводе (1) играют роль только трансформационные свойства взаимодействия, это выражение описывает потенциальную энергию поверхностных КО заряженной жидкой капли любой природы (например, металлического кластера [23]), при этом специфический характер взаимодействия содержится только в коэффициентах C_{mn} . Ограничиваясь слагаемыми до четвертого порядка по деформации и предполагая равенство масс для двух независимых направлений, мы получаем C_{3v} -симметричный гамильтониан

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + U_{QO}(x, y; a, b, c), \quad (3)$$

где

$$U_{QO}(x, y; a, b, c) = \frac{a}{2}(x^2 + y^2) + b(xy^2 - \frac{1}{3}x^3) + c(x^2 + y^2)^2 \quad (4)$$

$$x = a_0, y = \sqrt{2}a_2, a = 2C_{10}, b = 3C_{01}, c = C_{20}.$$

Удобно ввести безразмерные переменные

$$(x, y) = l_0(x', y'), (p_x, p_y) = p_0(p'_x, p'_y), E = \varepsilon_0 E' \quad (5)$$

$$l_0 = \frac{b}{c}, p_0 = \sqrt{m \frac{b^4}{c^3}}, \varepsilon_0 = \frac{b^4}{c^3}.$$

В переменных (x', y') (в дальнейшем мы будем опускать штрихи) гамильтониан (3) принимает вид

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + U_{QO}(x, y; W) \quad (6)$$

$$U_{QO}(x, y; W) = \frac{1}{2W}(x^2 + y^2) + xy^2 - \frac{1}{3}x^3 + (x^2 + y^2)^2.$$

В полярных координатах (ρ, φ) C_{3v} -симметрия гамильтониана становится явной

$$U_{QO}(\rho, \varphi; W) = \frac{\rho^2}{2W} - \frac{\rho^3}{3} \cos 3\varphi + \rho^4. \quad (7)$$

Гамильтониан (6) и соответствующие уравнения движения зависят только от $W = b^2/(ac)$, который является единственным безразмерным параметром, который можно сконструировать из параметров a , b и c , и он полностью определяет геометрию ППЭ. Область параметров с $0 < W \leq 16$ включает потенциалы с одной критической точкой — минимумом в начале координат (рис.1а), что соответствует сферически симметричной равновесной форме ядра (или жидкой капли). Поскольку область отрицательной гауссовой кривизны ППЭ ограничена, наблюдается двойной переход регулярность-хаос-регулярность при критических энергиях E_{cr1} и E_{cr2} соответственно [24].

Мы рассматриваем более подробно случай $W > 16$, в частности $W = 18$, когда ППЭ имеет семь критических точек: четыре минимума (один центральный, расположенный в начале координат, и три периферийных, соответствующих деформированным состояниям ядра), и три седла, отделяющие периферийные минимумы от центрального (рис.1б). Случай $W = 18$ удобен тем, что при таком выборе параметров глубины центрального и периферийных минимумов совпадают.

Существенной особенностью перехода от регулярности к хаосу в таком многоямном потенциале является то обстоятельство, что критическая энергия перехода имеет различное значение для разных локальных минимумов: $E_{cr} = E_S/2$ для центрального и $E_{cr} = E_S$ для периферийных минимумов, где E_S — потенциальная энергия в седловой точке. Соответственно, в интервале энергий $E_S/2 < E < E_S$ классическая динамика носит выраженно хаотический характер в центральном минимуме и остается регулярной в периферийных (рис.2). Такую разновидность динамики в многоямных потенциалах, когда доля хаотических траекторий близка к единице в одних локальных минимумах и равна нулю в других, мы будем называть смешанным состоянием.

Смешанное состояние не является уникальной особенностью потенциала КО, напротив, это ситуация общего положения для потенциалов с несколькими локальными минимумами, что можно видеть на примере таких полиномиальных потенциалов из семейства омбиллических катастроф, как

$$U_{D_5} = 2y^2 - x^2 + xy^2 + x^4/4 \quad (8)$$

и

$$U_{D_7} = \sqrt{2}y^2 + 3x^2/8 + xy^2 - x^4/2 + x^6/6. \quad (9)$$

Сравнение сечений Пуанкаре для этих потенциалов и потенциала КО показывает универсальный характер смешанного состояния (рис.3).

СПЕКТРАЛЬНЫЙ МЕТОД

Численное определение уровней энергии и вычисление стационарных волновых функций для систем с многоямными ППЭ встречает определенные технические трудности. В частности, нахождение достаточного большого числа энергетических уровней в потенциале (7) с $W > 16$ стандартным методом диагонализации в базисе гармонического осциллятора требует применения настолько большого числа базисных функций, которое выходит далеко за пределы возможностей вычислительной техники. В принципе, можно найти другую точно решаемую модель, которая будет лучше, чем гармонический осциллятор, аппроксимировать данный многоямный потенциал, но тогда для каждого потенциала придется искать такую аппроксимацию заново. К счастью, спектральный метод (СМ) решения уравнения Шредингера, предложенный в работе [21], малочувствителен к сложности формы ППЭ и поэтому обладает высокой универсальностью.

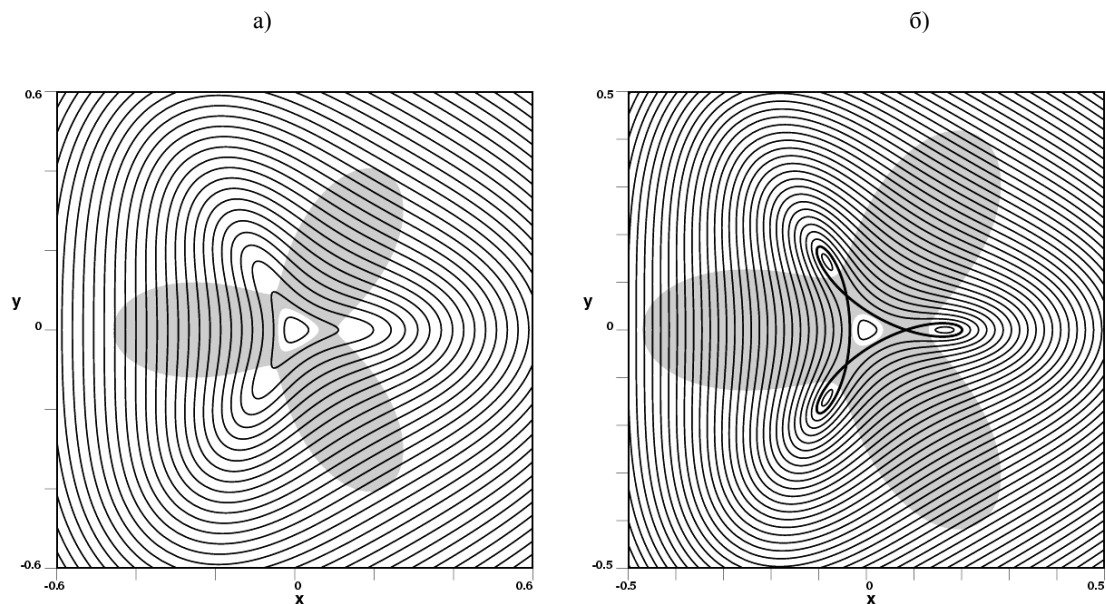
Для того, чтобы решить стационарное уравнение Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \Delta + U(x, y) \right] \psi_n(x, y) = E_n \psi_n(x, y) \quad (10)$$

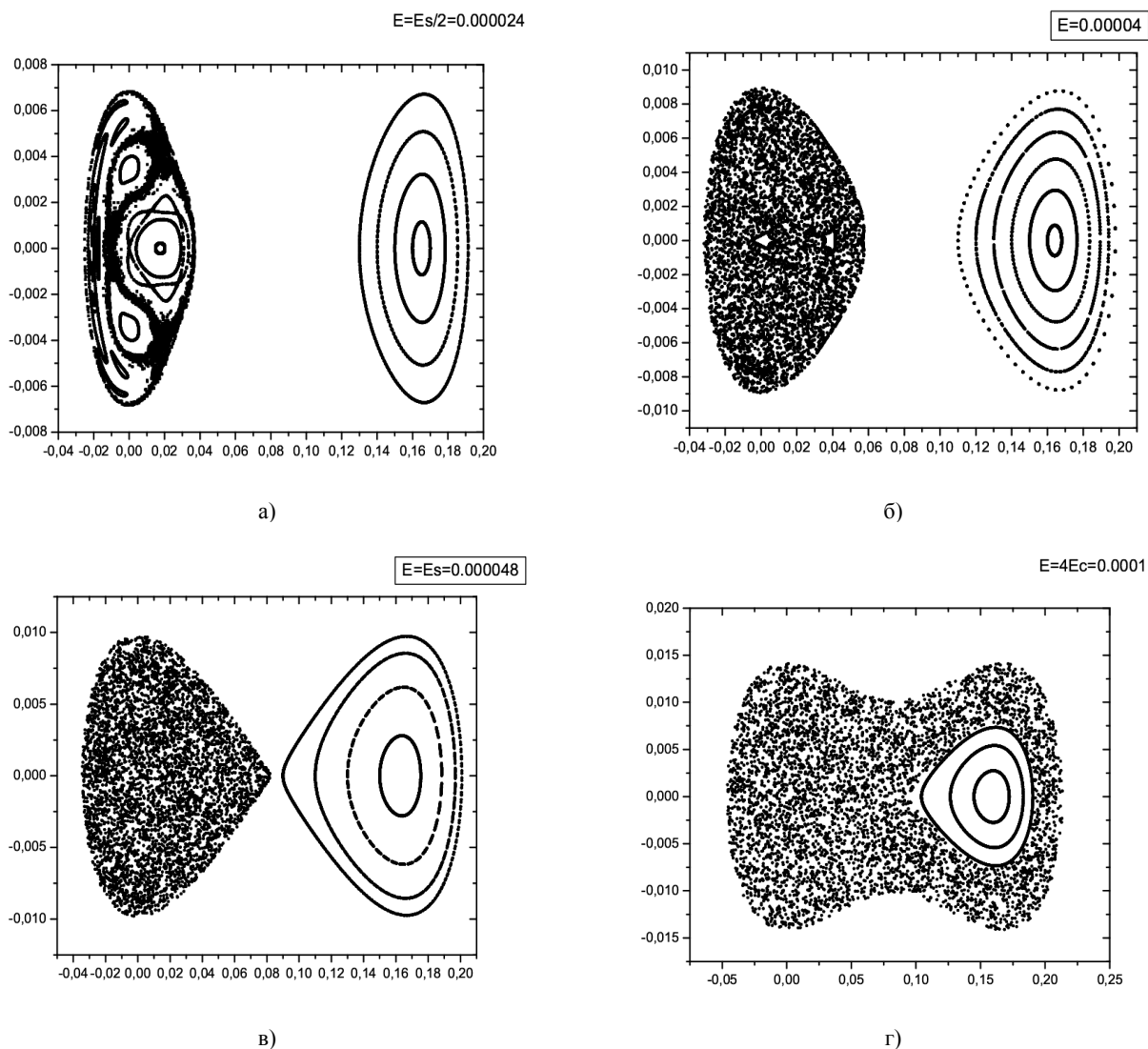
СМ, нужно найти решение соответствующего зависящего от времени уравнения Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \Delta + U(x, y) \right] \psi(x, y, t) = i\hbar \frac{d\psi(x, y, t)}{dt} \quad (11)$$

с произвольным начальным условием $\psi_0(x, y) = \psi(x, y, t=0)$. Решение $\psi(x, y, t)$ может быть построено с хорошей точностью с помощью метода разделенных операторов

Рис. 1. Линии уровня для потенциала (7) с $W = 13$ (а) и $W = 18$ (б).

Серым цветом закрашена область отрицательной гауссовой кривизны.

Рис. 2. Сечения Пуанкаре для потенциала (7) при $E = E_s/2$ (а), $E_s/2 < E < E_s$ (б), $E = E_s$ (в) и $E > E_s$ (г)

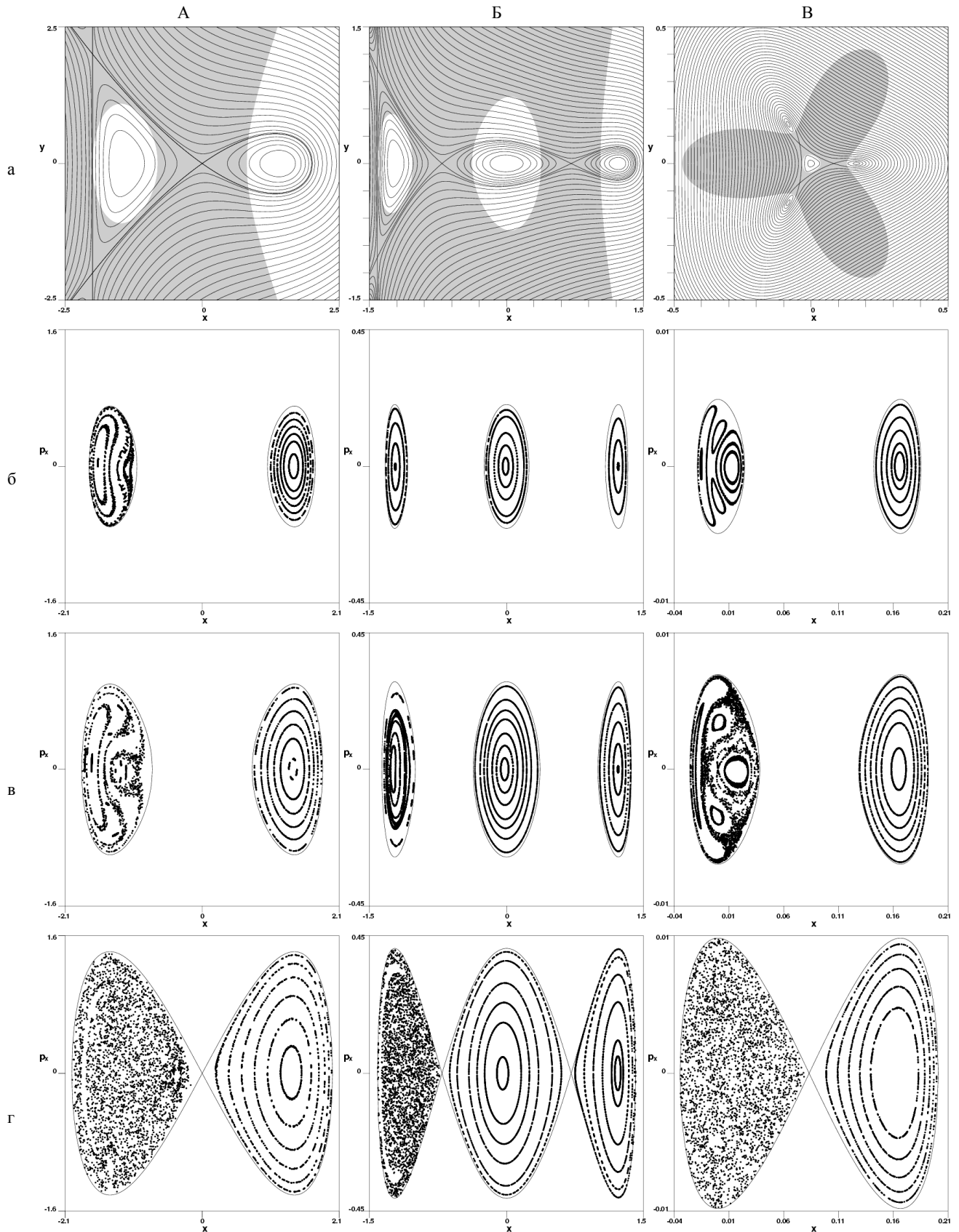


Рис.3. Линии уровня (а) и сечения Пуанкаре (б, в, г) для потенциалов (8) (А), (9) (Б) и (7) (В).

б) $E = E_S / 4$, в) $E = E_S / 2$, г) $E = E_S$. Серым цветом закрашены области отрицательной гауссовой кривизны.

Сплошная линия на сечениях Пуанкаре ограничивает классически разрешенную область фазового пространства.

$$\psi(x, y, t + \Delta t) = \exp\left(i \frac{\hbar^2 \Delta t}{4} \nabla^2\right) \exp[-i \Delta t U(x, y)] \exp\left(i \frac{\hbar^2 \Delta t}{4} \nabla^2\right) \psi(x, y, t) + O(\Delta t^3), \quad (12)$$

где действие оператора $\exp(i \hbar^2 \Delta t \nabla^2 / 4)$ на волновую функцию $\psi(x, y, t)$ вычисляется с помощью дискретного преобразования Фурье

$$\psi(x, y, t) = \sum_{m=-N/2+1}^{N/2} \sum_{n=-N/2+1}^{N/2} \psi_{mn}(t) \exp\left[\frac{2\pi i}{L_0}(mx + ny)\right], \quad (13)$$

где N – число узлов вдоль ребра сетки, а L_0 – его длина.

С другой стороны, решение $\psi(x, y, t)$ может быть разложено по стационарным волновым функциям $\psi_n(x, y)$ уравнения (10):

$$\psi(x, y, t) = \sum_n a_n \psi_n(x, y) \exp\left(-\frac{i E_n t}{\hbar}\right). \quad (14)$$

Определение уровней энергии требует вычисления на достаточно большом промежутке времени $0 < t < T$ корреляционной функции

$$P(t) = \int dx dy \bar{\psi}_0(x, y) \psi(x, y, t) = \sum_n |a_n|^2 \exp\left(-\frac{i E_n t}{\hbar}\right), \quad (15)$$

чей Фурье-образ

$$P(E) = \frac{1}{T} \int_0^T dt \exp\left(\frac{i E t}{\hbar}\right) P(t) w(t) = \sum_n |a_n|^2 \delta_T(E - E_n) \quad (16)$$

представляет собой набор острых пиков (типичная картина представлена на рис.4), расположенных при $E = E_n$, и имеющих профиль конечной δ -функции

$$\begin{aligned} \delta_T(E) &= \frac{1}{T} \int_0^T dt \exp\left(i \frac{E t}{\hbar}\right) w(t) = \\ &= \frac{\exp\left(i \frac{E T}{\hbar}\right) - 1}{i \frac{E T}{\hbar}} - \frac{1}{2} \left[\frac{\exp\left(i \frac{E T}{\hbar} + 2\pi\right) - 1}{i \left(\frac{E T}{\hbar} + 2\pi\right)} + \frac{\exp\left(i \frac{E T}{\hbar} - 2\pi\right) - 1}{i \left(\frac{E T}{\hbar} - 2\pi\right)} \right] = \frac{8\pi^2 \sin\left(\frac{E T}{2\hbar}\right) e^{i \frac{E T}{2\hbar}}}{\frac{E T}{\hbar} \left(4\pi^2 - \frac{E^2 T^2}{\hbar^2}\right)}. \end{aligned} \quad (17)$$

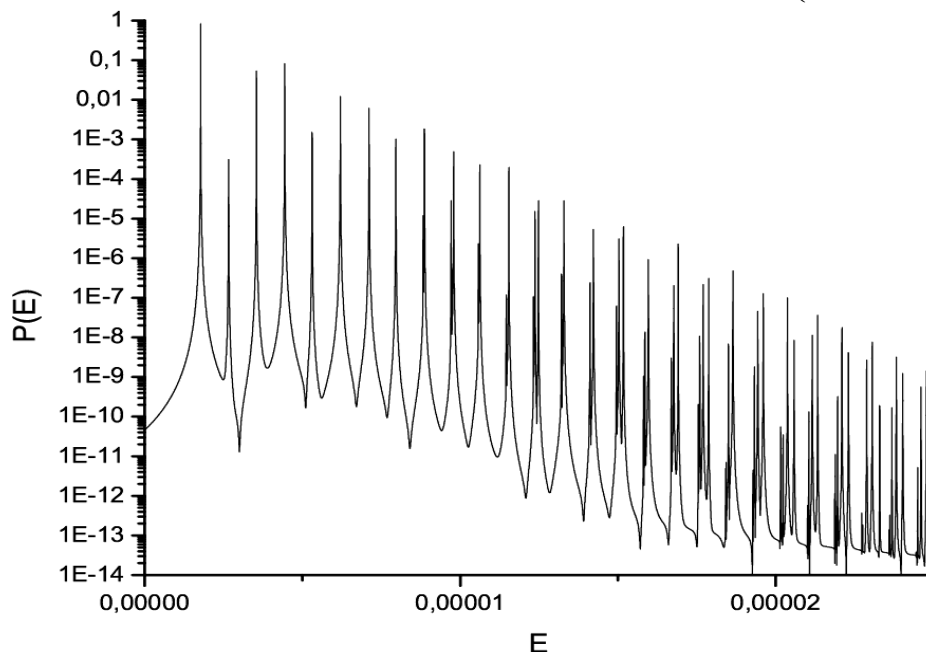


Рис. 4. Модуль $P(E)$ для вычисления состояний E -типа в потенциале (7) для $W = 13$.

Функция Ханнинга $w(t) = 1 - \cos(2\pi t/T)$ вводится для того, чтобы осциллирующие хвосты $\delta_T(E)$ убывали быстрее — как $1/E^3$ вместо $1/E$. Благодаря этому паразитные пики в $P(E)$, вызванные осцилляциями хвостов $\delta_T(E)$, имеют меньшую величину, чем пики, связанные с истинными энергетическими уровнями, что позволяет отделить истинные уровни от паразитных по амплитуде соответствующих пиков. Поскольку профиль пиков известен аналитически (17), это позволяет улучшить точность вычисления уровней энергии с помощью соответствующего фитинга. Обычно достаточная точность достигается с помощью фитинга первого порядка, описанного в работе [21].

Как только уровни энергии E_n известны, соответствующие стационарные волновые функции $\psi_n(x, y)$ могут быть получены из $\psi(x, y, t)$ путем численного интегрирования по времени

$$\psi_n(x, y) = \frac{1}{T} \int_0^T dt \exp\left(\frac{iE_n t}{\hbar}\right) w(t) \psi(x, y, t). \quad (18)$$

Такая численная процедура является весьма эффективной, если выполняется с применением быстрого преобразования Фурье, и достаточно точной, поскольку пространственные производные $\psi(x, y, t)$ аппроксимируются с точностью порядка $(L_0/N)^N$. L_0 и N должны быть достаточно велики, а начальная волновая функция $\psi_0(x, y)$ должна убывать достаточно быстро вместе со своими Фурье компонентами, чтобы на всем протяжении вычислений $0 < t < T$ волновая функция $\psi(x, y, t)$ была пренебрежимо мала на границе дискретной сетки как в координатном, так и в импульсном пространстве. Шаг вычислений по времени Δt определяет максимальную спектральную ширину $\Delta E_{\max} = \pi\hbar/\Delta t$ зависящей от времени функции $P(t)$, которая может быть представлена в виде ряда Фурье, определенного по ее значениям в дискретных точках $t_k = k\Delta t$. Таким образом, временной шаг Δt должен быть достаточно мал, чтобы в ΔE_{\max} попало достаточное количество энергетических уровней, или $\Delta E_{\max} > \Delta U_{\max}$, где ΔU_{\max} — глубина потенциальной ямы. Поскольку потенциал (7) не ограничен сверху, для применения СМ необходимо его обрезать при достаточно высоких энергиях, что не окажет заметного влияния на более низкоэнергетические состояния. Если волновая функция $\psi(x, y, t)$ вычислена на интервале времени $T = M\Delta t$, то минимальное расстояние между уровнями, которое может быть разрешено, равно $\Delta E_{\min} = \pi\hbar/T$, что дает оценку точности вычислений уровней энергии, которые определяются по численно полученному Фурье-образу корреляционной функции $P(E)$. Применение фитинга, однако, позволяет улучшить точность приблизительно на два порядка.

При достаточно больших значениях числа шагов по времени M и по координате N результаты вычислений действительно не зависят от выбора произвольной начальной волновой функции $\psi_0(x, y)$, однако именно разумный выбор такой функции является наиболее мощным средством оптимизации вычислений по СМ с целью достижения достаточной точности результатов при минимальных затратах вычислительных ресурсов.

Если гамильтониан задачи обладает какой-либо симметрией, то собственные состояния могут быть разделены на группы по свойствам симметрии. В таком случае вычисления будут более эффективными, если производить их для каждой группы состояний отдельно, что достигается выбором начальной волновой функции определенной симметрии. Например, если гамильтониан обладает четностью, то будет разумным проводить вычисления в два приема — для четных и для нечетных состояний отдельно, возбуждая состояния нужной четности соответствующим выбором начальной волновой функции $\psi_0(x, y)$.

Удобно выбирать $\psi_0(x, y)$ в виде комбинации гауссовых волновых пакетов минимальной неопределенности

$$\psi_G(x, y) = \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2} - i\frac{p_x(x-x_0)}{\hbar} - i\frac{p_y(y-y_0)}{\hbar}\right]. \quad (19)$$

Комбинируя функции вида (18) с различными параметрами, можно добиться того, что в начальном состоянии

$$\psi_0(x, y) = \sum_n a_n \psi_n(x, y) \quad (20)$$

будут избирательно возбуждены собственные состояния $\psi_n(x, y)$ с определенными свойствами симметрии, и лежащие в заданном интервале энергий. Положение этого интервала

$$\langle E \rangle = \langle \psi_0(x, y) | H | \psi_0(x, y) \rangle \quad (21)$$

и приблизительная ширина

$$\Delta E^2 = \langle \psi_0(x, y) | (H - \langle E \rangle)^2 | \psi_0(x, y) \rangle \quad (22)$$

определяются параметрами гамильтониана и гауссовых волновых пакетов, образующих начальное состояние $\psi_0(x, y)$, и при желании могут варьироваться в широких пределах. Это, в частности, позволяет вычислять низкоэнергетические и высокоэнергетические состояния по отдельности, более эффективно распределяя вычислительные ресурсы.

При применении СМ основная часть машинного времени уходит на нахождение $\psi(x, y, t)$, при этом основная часть вычислительных затрат связана именно с многократным выполнением прямого и обратного быстрого преобразования Фурье. В нашем случае двумерных задач характерное время счета ведет себя как $MN^2 \ln N$, что существенно лучше, чем N^6 для метода диагонализации. Другим важным преимуществом СМ является возможность получения по формуле (18) нескольких собственных функций параллельно, при этом время вычисления, скажем, 100 собственных функций всего лишь вдвое больше, чем одной функции, что особенно удобно при необходимости нахождения многих состояний.

Вычисления обычно проводились с $N = 512$ и $M = 65536$. Это позволяло находить порядка 10^2 состояний с достаточной точностью, при этом на процессоре Pentium IV 2.4 GHz уходило около 8 часов машинного времени на вычисление энергетического спектра и еще порядка 15 часов на получение стационарных волновых функций. Таблица демонстрирует хорошее согласие полученных результатов с уже известными [24] для одномерного случая в потенциале (7).

Таблица. Сравнение результатов вычислений уровней энергии в потенциале (7) для $W = 13$ с эффективной постоянной Планка $\hbar = 3.2 \cdot 10^{-6}$, полученных методом диагонализации (МД) в работе [24] и СМ в настоящей работе.

№ уровня	Тип	МД	СМ	Разница, %
1	A1	$0,887566 \cdot 10^{-6}$	$0,887597 \cdot 10^{-6}$	0,0035
2	E	$0,177442 \cdot 10^{-5}$	$0,177449 \cdot 10^{-5}$	0,0039
3	A1	$0,265835 \cdot 10^{-5}$	$0,265848 \cdot 10^{-5}$	0,0049
4	E	$0,266207 \cdot 10^{-5}$	$0,266223 \cdot 10^{-5}$	0,0060
5	E	$0,354316 \cdot 10^{-5}$	$0,354332 \cdot 10^{-5}$	0,0045
6	A1	$0,355062 \cdot 10^{-5}$	$0,355078 \cdot 10^{-5}$	0,0045
7	A2	$0,355062 \cdot 10^{-5}$	$0,355083 \cdot 10^{-5}$	0,0059
8	A1	$0,442505 \cdot 10^{-5}$	$0,442525 \cdot 10^{-5}$	0,0045
9	E	$0,442878 \cdot 10^{-5}$	$0,442884 \cdot 10^{-5}$	0,0014
10	E	$0,444262 \cdot 10^{-5}$	$0,444025 \cdot 10^{-5}$	0,0533
11	E	$0,530773 \cdot 10^{-5}$	$0,530803 \cdot 10^{-5}$	0,0057
145	E	$0,210066 \cdot 10^{-4}$	$0,210080 \cdot 10^{-4}$	0,0067
146	A1	$0,210092 \cdot 10^{-4}$	$0,210108 \cdot 10^{-4}$	0,0076
147	A2	$0,210225 \cdot 10^{-4}$	$0,210237 \cdot 10^{-4}$	0,0057
148	E	$0,210323 \cdot 10^{-4}$	$0,210337 \cdot 10^{-4}$	0,0067
149	E	$0,210527 \cdot 10^{-4}$	$0,210545 \cdot 10^{-4}$	0,0086
150	A1	$0,210811 \cdot 10^{-4}$	$0,210826 \cdot 10^{-4}$	0,0071
151	A2	$0,210811 \cdot 10^{-4}$	$0,210796 \cdot 10^{-4}$	0,0071
152	E	$0,211166 \cdot 10^{-4}$	$0,211618 \cdot 10^{-4}$	0,2141
246	E	$0,271195 \cdot 10^{-4}$	$0,271218 \cdot 10^{-4}$	0,0085
247	A2	$0,271577 \cdot 10^{-4}$	$0,271592 \cdot 10^{-4}$	0,0055
248	A1	$0,271577 \cdot 10^{-4}$	$0,271563 \cdot 10^{-4}$	0,0052

Для более интересного, двумерного случая в том же потенциале, сравнение с независимо полученными результатами невозможно ввиду отсутствия таковых. Однако СМ предоставляет возможности для детального контроля точности вычислений, как показано на рис. 5 для определения двух близких уровней энергии. С увеличением числа шагов по времени M от 2^9 до 2^{18} пики $P(E)$ становятся все более выраженными (рис. 5а).

При этом для $M = 2^9$ и $M = 2^{10}$ разрешение по энергии еще слишком мало, и два соседних уровня выглядят как один. При $M = 2^{11}$ этот дублет уже разрешается, однако полученные энергии уровней еще заметно отличаются от истинных. Достаточная точность определения уровней достигается при $M = 2^{13}$ и дальнейшее увеличение M не приводит к заметным изменениям значений энергетических уровней (рис. 5б). Точность полученных результатов быстро растет с увеличением M и может быть сделана сколь угодно высокой (рис. 5в).

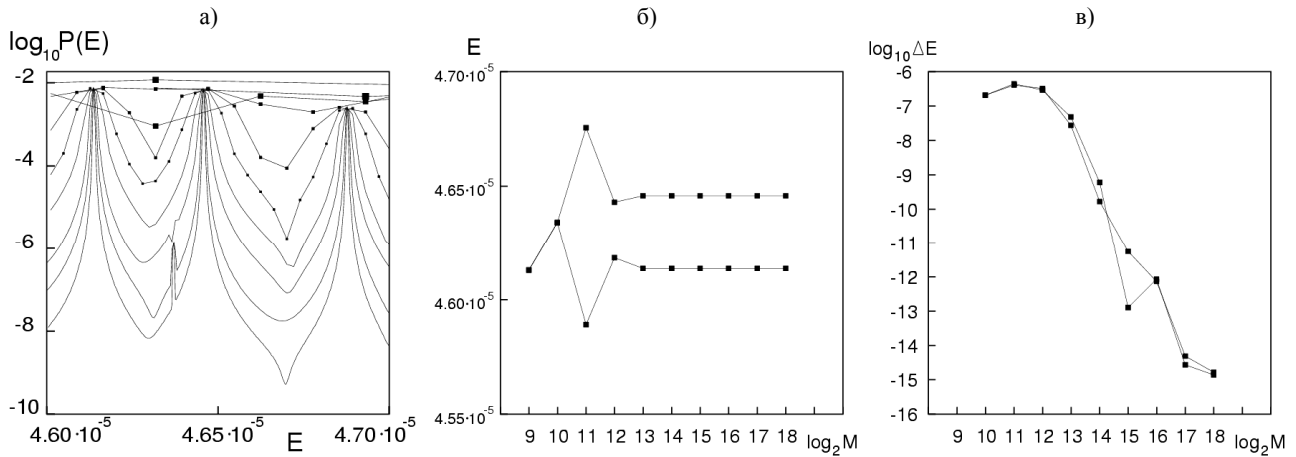
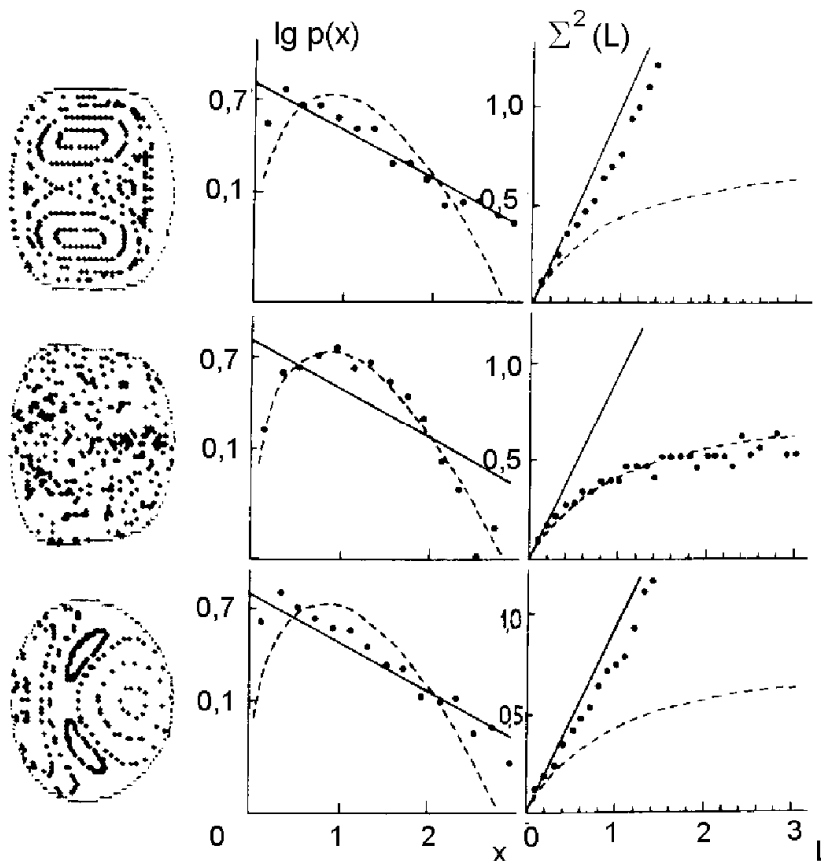


Рис.5. Определение двух близких уровней энергии E_n и E_{n+1} в потенциале (7) с $W = 18$

и различным числом шагов по времени $M = 2^k$, $k = 9, 10 \dots 18$

- а) модуль $P^{(k)}(E)$ в логарифмическом масштабе; б) значения $E_n^{(k)}$ и $E_{n+1}^{(k)}$;
в) последовательные поправки $E_n^{(k-1)} - E_n^{(k)}$ и $E_{n+1}^{(k-1)} - E_{n+1}^{(k)}$.

РЕЗУЛЬТАТЫ



Корреляции между характером классического движения и статистическими свойствами энергетического спектра для потенциала (7) были исследованы в работе [24] в однояном случае с $W = 13$. На сечениях Пуанкаре (рис. 6) видно, что классическое движение является чисто регулярным при низких и высоких энергиях и чисто хаотическим при средних энергиях, и соответственно распределение расстояний между соседними уровнями $S_k = E_{k+1} - E_k$ описывается функцией распределения Пуассона

Рис.6. Корреляции между характером классического движения и статистическими свойствами энергетического спектра для потенциала (7) с $W = 13$.

Точки – численные данные, сплошная линия – распределение Пуассона (22), пунктирная линия – распределение Вигнера (23).

$$P(S) = \exp(-S) \quad (23)$$

для регулярных и функцией распределения Вигнера

$$P(S) = \frac{\pi S}{2} \exp\left(-\frac{\pi S^2}{4}\right) \quad (24)$$

для хаотических состояний. В случае смешанного состояния в многочленном потенциале (7) классическое движение носит существенно смешанный характер (рис. 2) и статистические свойства энергетического спектра должны описываться функцией распределения смешанного типа, такой как распределение Берри-Робника-Богомольного

$$P(S) = \mu^2 \exp(-\mu S) \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{\pi}}{2}(1-\mu)S\right) + \left(2\mu(1-\mu) + \frac{\pi}{2}(1-\mu)^3 S\right) \exp\left(-\mu S - \frac{\pi}{4}(1-\mu)^2 S^2\right), \quad (25)$$

в котором параметр μ равен относительному фазовому объему регулярных траекторий. В случае потенциала (8) $\mu = 1$ для $E < E_{cr}$ и близко к $1/3$ для $E > E_{cr}$, что хорошо согласуется с численными данными для статистики энергетических уровней (рис. 7).

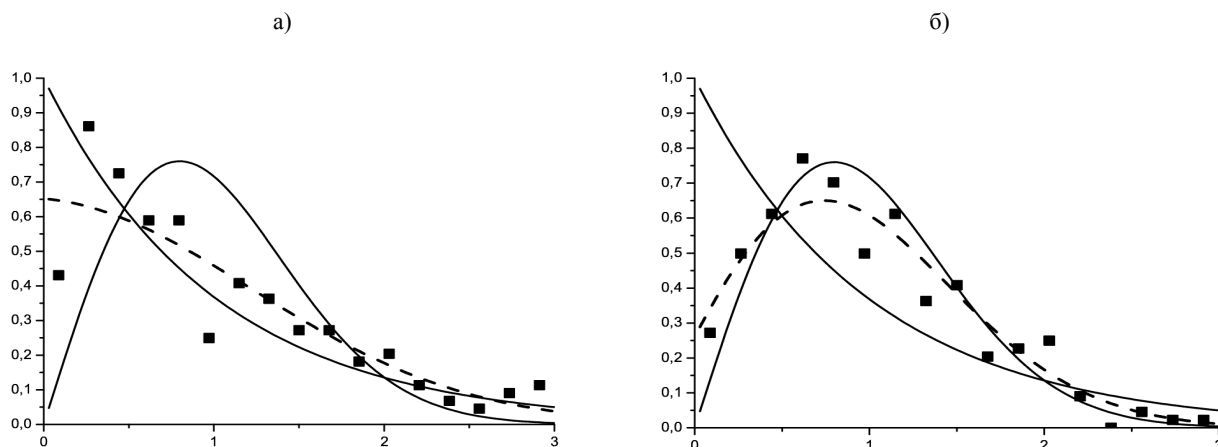


Рис. 7. Функция распределения расстояний между соседними уровнями для потенциала D_5 (8)

а) $E < E_{cr}$, б) $E > E_{cr}$, точки – численные данные, пунктирная линия – наилучший фитинг распределением Берри-Робника-Богомольного (24), сплошные линии – распределения Пуассона (22) и Вигнера (23).

Представляется интересным сравнить результаты с распределением, предложенным недавно в работе [18]

$$P(S) = \mu^2 F\left(\frac{S}{\nu^2}\right) \exp(-\mu S) \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{\pi}}{2}(1-\mu)S\right) + \left(2\mu(1-\mu)F\left(\frac{S}{\nu}\right) + \frac{\pi}{2}(1-\mu)^3 S\right) \exp\left(-\mu S - \frac{\pi}{4}(1-\mu)^2 S^2\right), \quad (26)$$

$$F(x) = 1 - \frac{1 - \sqrt{\frac{\pi}{2}}x}{\exp(x) - x}$$

и обнаружить влияние туннелирования на функцию распределения, однако для этого требуется дальнейшее увеличение точности вычислений энергетического спектра.

Пространственная структура стационарных волновых функций также зависит от характера классического движения. В работе [24] это продемонстрировано для случая одной ямы с $W = 13$ в потенциале (7) (рис. 8).

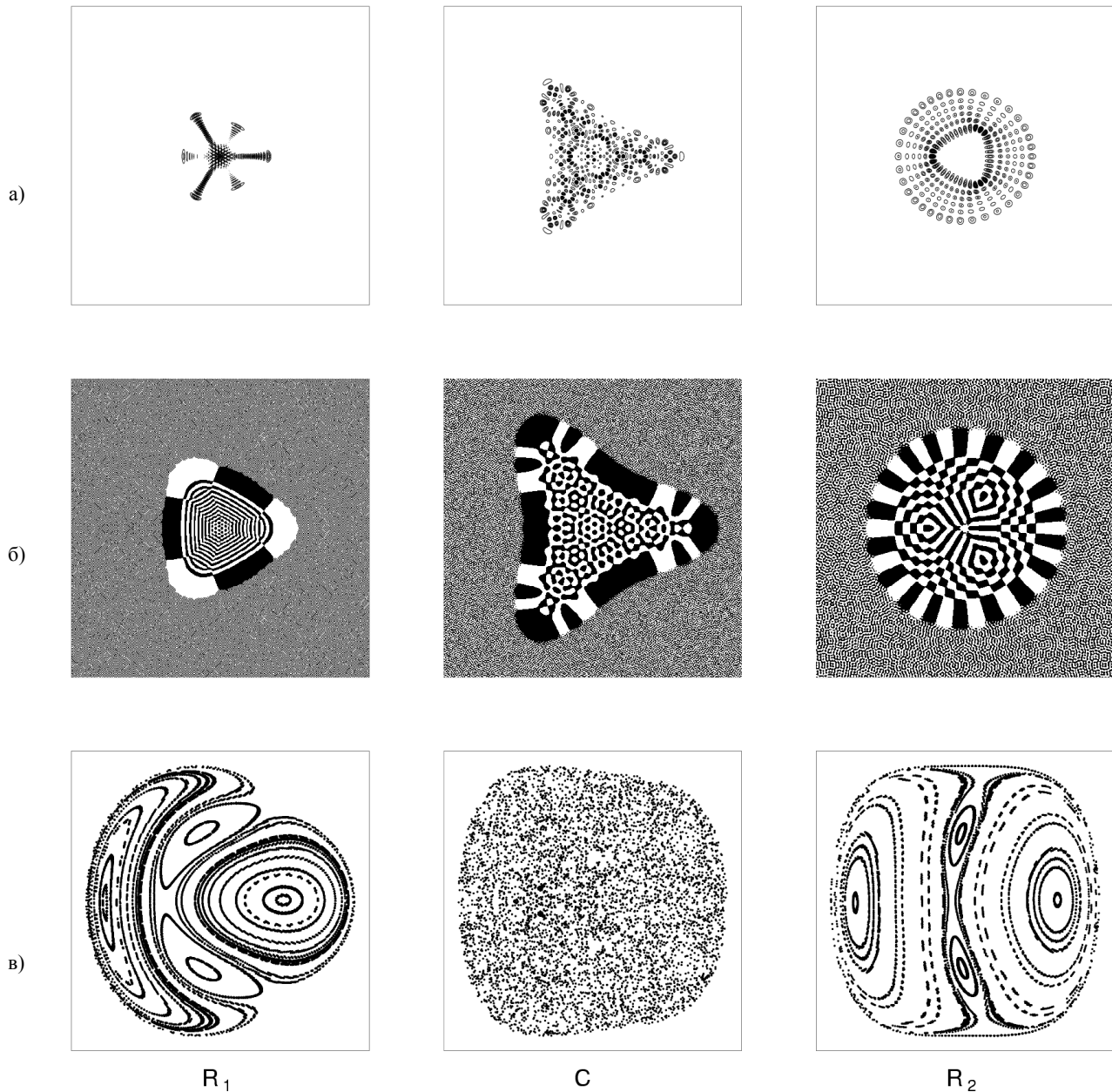


Рис.8. Двойной переход регулярность-хаос-регулярность в потенциале (7) для $W = 13$

линии уровня квадрата модуля (а) и структура нодальных доменов (б) стационарных волновых функций находятся в соответствии с классическими сечениями Пуанкаре (в).

Волновые функции регулярных состояний $R1$ ($E < E_{cr1}$) и $R2$ ($E > E_{cr2}$) локализованы вблизи устойчивых периодических орбит, в то время как характерная амплитуда хаотических волновых функций C ($E_{cr1} < E < E_{cr2}$) практически постоянна внутри классически разрешенной области. Еще более наглядны КПКС в структуре нодальных доменов:

- внутри классически разрешенной области нодальные домены регулярных состояний имеют правильную структуру, подобную шахматной доске, для хаотических же состояний нодальные домены никакой определенной структуры не образуют;
- нодальные линии регулярных состояний пересекаются между собой, для хаотических состояний характерно избегание пересечений;
- на границе классически разрешенной области нодальная структура регулярных волновых функций претерпевает резкую перестройку, из шахматноподобной превращаясь в полосатую с радиальными нодальными линиями, уходящими на бесконечность, что делает саму границу классически разрешенной области хорошо

различимой в нодальной структуре регулярных волновых функций; для хаотических состояний характерно существование переходного слоя вблизи границы классически разрешенной области, в котором нодальная структура перестраивается достаточно плавно, и некоторые радиально направленные нодальные кривые замыкаются друг на друга уже в классически запрещенной области.

В многоямных потенциалах общего вида стационарные волновые функции, как правило, сильно локализованы в одном или нескольких локальных минимумах. В частности, в случае смешанного состояния, амплитуда подавляющего большинства волновых функций в одном и другом локальном минимуме отличается на несколько порядков, что затрудняет анализ ее распределения. Это обстоятельство, однако, несущественно для анализа нодальной структуры волновых функций, особенности которой находятся в согласии с вышеперечисленными для одноямного случая, с той разницей, что характерные черты регулярных и хаотических состояний присутствуют в одной и той же стационарной волновой функции смешанного состояния, и их проявление носит универсальный характер, как видно из сравнения смешанного состояния в потенциалах КО (7) и D_5 (8) на (рис. 9). Очевидно, свойства волновых функций дают гораздо более богатый материал для изучения КПКС, чем свойства энергетического спектра, но эти исследования требуют больших вычислительных затрат.

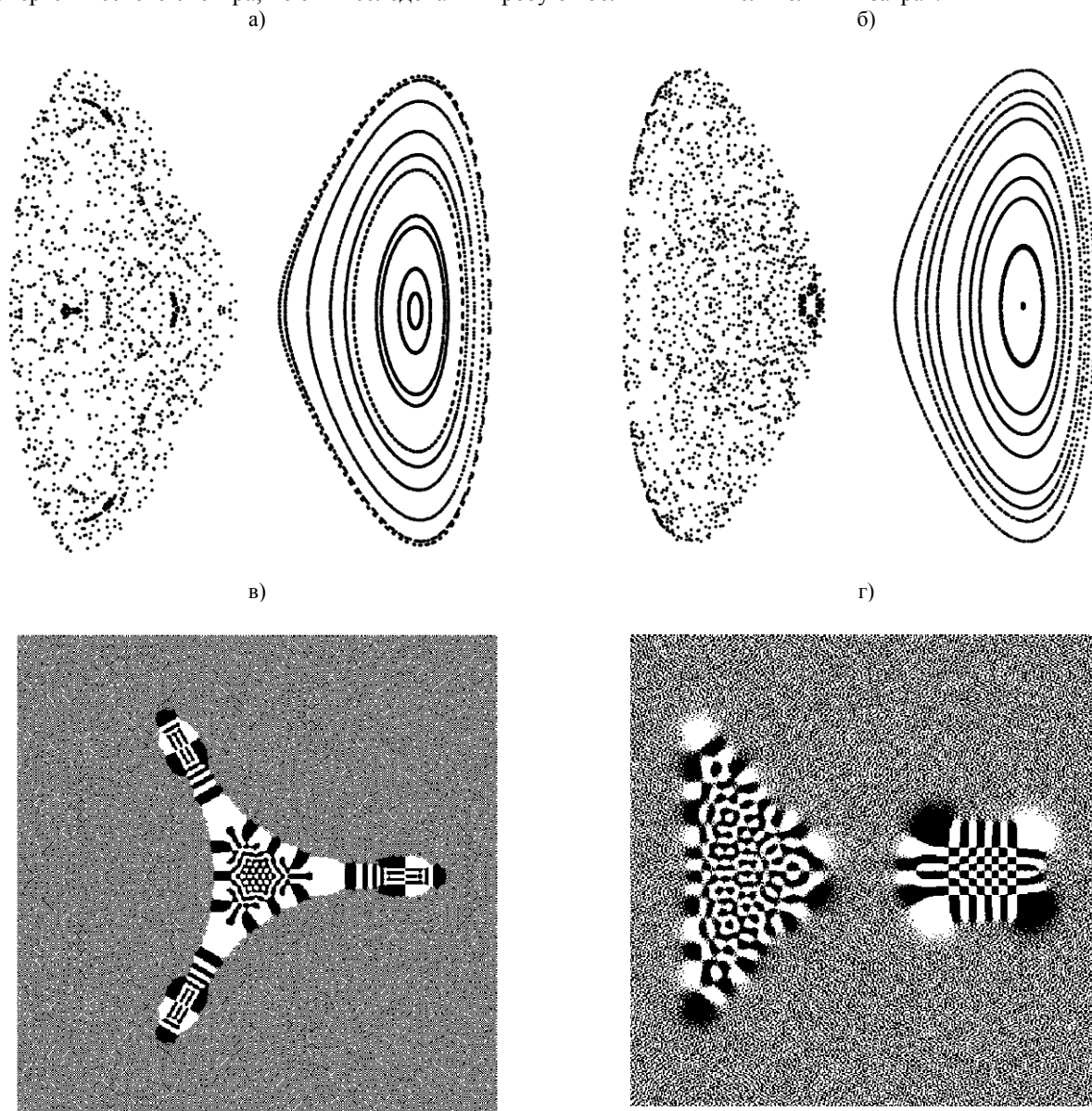


Рис.9. Сечение Пуанкаре и нодальная структура стационарной волновой функции одинаковой энергии в смешанном состоянии: а) и в) – в потенциале КО (7), б) и г) – в потенциале D_5 (8).

В наиболее тесной идеологической связи с классической динамикой находятся КПКС в динамике гауссовых волновых пакетов минимальной дисперсии (18), которые в квазиклассическом пределе являются квантовым аналогом материальной точки и достаточно хорошо воспроизводят характерные свойства классических

траекторий. В случае смешанного состояния движение носит квазипериодический характер в одном из минимумов и стохастический в другом, при этом хаотическое классическое движение характеризуется быстрым затуханием корреляций (рис. 10а). Это проявляется и в квантовых корреляционных функциях вида (15): периодически повторяющиеся пики соответствуют квазипериодическому регулярному движению в одном из минимумов (рис. 10б), при той же энергии в другом минимуме наблюдается аperiодическое движение с быстрым затуханием корреляций (рис. 10в), что связано с намного более быстрым расплыванием волновых пакетов при хаотическом, чем при регулярном движении.

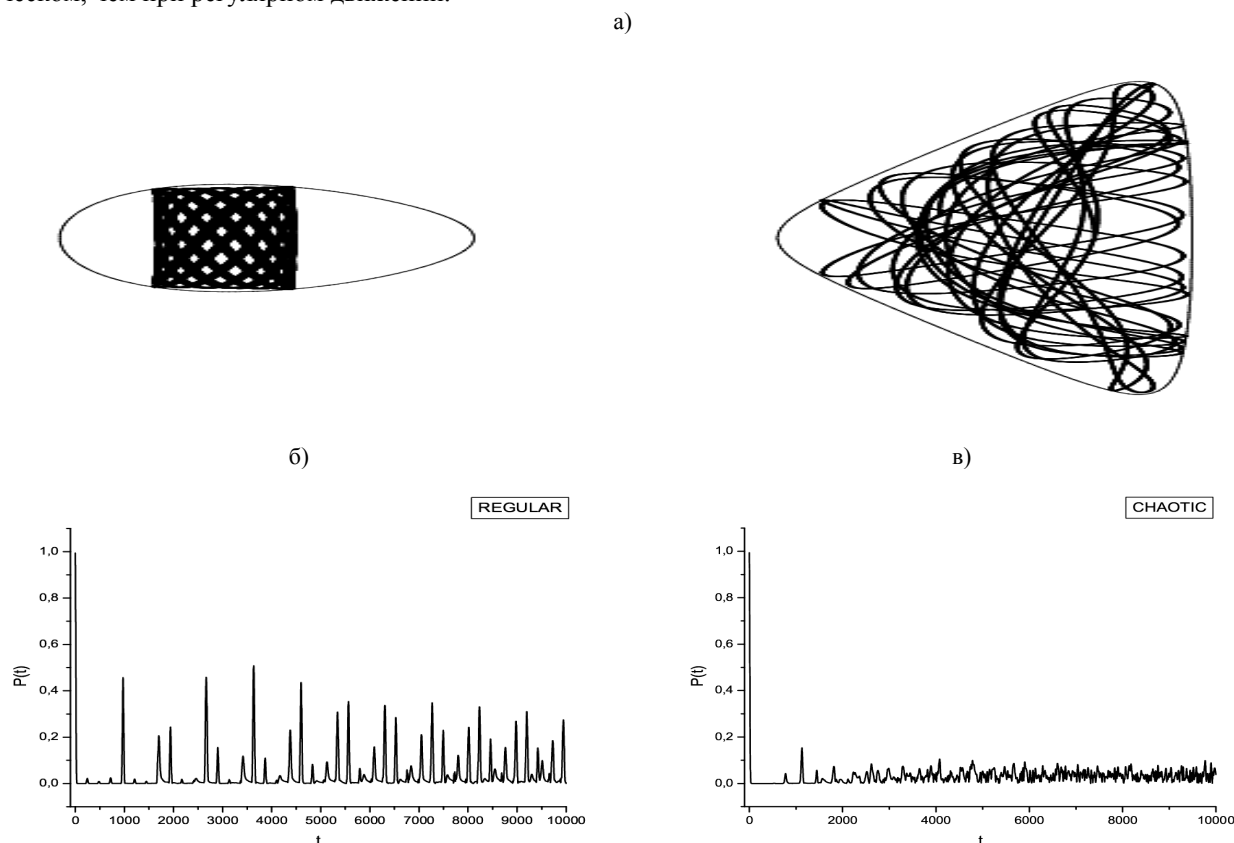


Рис.10. Характерные траектории для энергий в области смешанного состояния (а) и корреляционные функции (15) для эквивалентных гауссовых волновых пакетов в регулярном (б) и хаотическом локальном минимуме (в) потенциала D_5 .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Смешанное состояние является таким же типичным и универсальным явлением в потенциалах с несколькими локальными минимумами, как и сам динамический хаос в нелинейных системах. Изучение КПКС в смешанном состоянии открывает новые горизонты в области квантового хаоса. С другой стороны, реалистичные модели описания динамики атомного ядра, в частности, квадрупольных осцилляций и супердеформированных состояний, приводят как раз к введению в рассмотрение потенциалов размерности 2 и более, обладающих несколькими локальными минимумами, и с неизбежностью к смешанному состоянию.

В данной работе изучены наиболее фундаментальные КПКС в смешанном состоянии: функция распределения расстояний между соседними уровнями, нодальная структура стационарных волновых функций и расплывание волновых пакетов. Среди наиболее актуальных направлений развития исследований можно отметить следующие:

- изучение влияния туннелирования в смешанном состоянии на статистические свойства энергетического спектра;
- исследование статистических свойств волновых функций смешанного состояния: распределение квадрата амплитуды волновой функции, числа нодальных доменов и количества радиальных нодальных линий, характерного радиуса квазипересечений нодальных кривых, фрактальных свойств нодальной структуры;
- изучение особенностей динамического туннелирования в смешанном состоянии.

Последнее приобретает особую актуальность в связи с активными экспериментальными исследованиями распада супердеформированных состояний ядер, который как раз и связан с туннелированием из регулярных супердеформированных состояний в хаотические нормально деформированные, то есть происходит именно в смешанном состоянии.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Gutzwiller M. Chaos in Classical and Quantum Mechanics. Berlin: Springer. - 1991. - 434p.
2. Reichl L.E. The Transition to Chaos. Berlin: Springer. - 1992. - 552p.
3. Haake F. Quantum Signatures of Chaos. Berlin: Springer. - 1991. - 480p.
4. Quantum Chaos and Statistical Nuclear Physics. Eds. Seligman T.H., Nishioka H. Heidelberg: Springer. - 1986. - 512p.
5. Елютин П.В. Проблема квантового хаоса. // УФН. - 1988. - Т. 155. - С. 397-442.
6. Weissman J., Jortner J. Quantum manifestations of classical stochasticity. II. Dynamics of wave packets of bound states. // J. Chem. Phys. - 1982. - V. 77. - P. 1486-1500.
7. McDonald S.W., Kaufman A.N. Wave chaos in the stadium: Statistical properties of short-wave solutions of the Helmholtz equation. // Phys. Rev. A. - 1988. - V. 37. - P. 3067-3086.
8. Prozen T., Robnik M. Survey of the eigenfunctions of a billiard system between integrability and chaos. // J. Phys. A. - 1993. - V. 26. - P. 5365-5374.
9. Izrailev F.M. Simple models of quantum chaos: Spectrum and eigenfunctions. // Phys. Rep. - 1990. - V. 196. - P. 299-392.
10. Stratt R.M., Handy N.C., Miller W.H. On the quantum mechanical implications of classical ergodicity. // J. Chem. Phys. - 1979. - V. 71. - P. 3311-3322.
11. Болотин Ю.Л., Гончар В.Ю., Тарасов В.Н. Квантовые проявления классической стохастичности в структуре волновых функций квадрупольных колебаний ядер. // ЯФ. - 1995. - Т. 58. - С. 1590.
12. Brack M. et al. Funny Hills: The Shell-Correction Approach to Nuclear Shell Effects and Its Applications to the Fission Process. // Rev. Mod. Phys. - 1972. - V. 44. - P. 320-405.
13. Janssens R.V., Khoo T.L. Superdeformed Nuclei. // Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. - 1991. - V. 41. - P. 321-355.
14. Болотин Ю.Л., Гончар В.Ю., Инопин Е.В. Хаос и катастрофы в квадрупольных колебаниях ядер. // ЯФ. - 1987. - Т. 45. - С. 45.
15. Berry M.V., Robnik M. Semiclassical level spacings when regular and chaotic orbits coexist. // J. Phys. A. - 1984. - V. 17. - P. 2413-2422.
16. Богомольный Е. Распределение уровней энергии квантовых систем. // Письма ЖЭТФ. - 1985. - Т. 41. - С. 55-58.
17. Podolskiy V., Narimanov E. Semiclassical Description of Chaos-Assisted Tunneling. // Phys. Rev. Lett. - 2003. - V. 91. - P. 263601.
18. Davis M.J., Heller E.J. Quantum dynamical tunneling in bound states. // J. Chem. Phys. - 1981. - V. 75. - P. 246-254.
19. Berezovoj V.P., Bolotin Yu.L., Cherkaskiy V.A. Quantum Manifestations of Classical Stochasticity in the Mixed State. // Prog. Theor. Phys. Supplement. - 2003. - V. 150. - P. 326-329.
20. Berezovoj V.P., Bolotin Yu.L., Cherkaskiy V.A. Signatures of quantum chaos in wave functions structure for multi-well 2D potentials. // Phys. Lett. A. - 2004. - V. 323. - P. 218-223.
21. Feit M.D., Fleck J.A., Steiger Jr. and A. Solution of the Schrödinger Equation by a Spectral Method. // J. Comput. Phys. - 1982. - V. 47. - P. 412-433.
22. Mozel V., Greiner W. Investigation of the collective potential energy surface. // Z. Phys. - 1968. - V. 217. - P. 256.
23. Saunders W.A. Fission and liquid-drop behavior of charged gold clusters. // Phys. Rev. Lett. - 1990. - V. 64. - P. 3046-3049.
24. Berezovoj V.P., Bolotin Yu.L., Gonchar V.Yu., Granovsky M.Ya. Quadrupole oscillations as paradigm of the chaotic motion in nuclei. // Particles & Nuclei. - 2003. - V. 34/2/. - P. 388-447.
25. Bies W.E., Heller E.J. Nodal structure of chaotic eigenfunctions. // J. Phys. A. - 2002. - V. 35. - P. 5673-5686.

SIGNATURES OF QUANTUM CHAOS IN QUADRUPOLE SURFACE OSCILLATIONS OF NUCLEI

V.P. Berezovoj, Yu.L. Bolotin, V.A. Cherkaskiy

*Akhiezer Institute for Theoretical Physics**National Scientific Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"**Academicheskaya Str.1, 61108 Kharkov, Ukraine*

Quadrupole surface oscillations of atomic nuclei in liquid drop model represent a paradigm for quantum chaos. Depending on parameters of the nucleus corresponding potential can have one or several local minima. In the latter case the mixed case is observed, which is general situation for multi-well two-dimensional potentials. We investigate the quantum manifestations of classical stochasticity in the energy levels statistics, wave functions structure and wave packets dynamics in the mixed state.

KEY WORDS: quantum chaos, mixed state, spectral method, quadrupole oscillations of nuclei