

УДК 530.14

КОМБИНИРОВАННОЕ ПРИМЕНЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ И АНАЛИТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ КВАНТОВОГО ХАОСА В ГЛАДКИХ ПОТЕНЦИАЛАХ СЛОЖНОЙ ГЕОМЕТРИИ

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 18 ноября 2005г.*

В работе дан краткий обзор основных типов вычислительных задач, возникающих при исследовании проявлений квантового хаоса в конкретных физических моделях — нахождение энергетического спектра, получение стационарных волновых функций, моделирование временной эволюции волновых пакетов. Проанализированы достоинства, недостатки и особенности применения некоторых численных и аналитических методов решения подобных задач — метода диагонализации и спектрального метода решения уравнения Шредингера, различных методов разворачивания спектра и других. Продемонстрированы и объяснены преимущества спектрального метода перед методом диагонализации.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: квантовый хаос, численные методы, квазиклассический подход

Исследования в области детерминированного хаоса, как классического, так и квантового, как никакая другая область современной физики обязана своим развитием увеличению возможностей вычислительных машин. Число научных статей по этой теме, публикуемой за год, растет по закону $N \sim e^{\lambda t}$, где $\lambda \approx 0,23 \text{ год}^{-1}$ [1]. Такое значение λ значительно больше показателя роста всего массива научных публикаций ($\lambda \approx 0,046 \text{ год}^{-1}$ [2]), но очень близко к показателю роста дешевизны компьютерных расчетов ($\lambda \approx 0,25 \text{ год}^{-1}$ [3]). Это не удивительно, поскольку большая часть этих работ посвящена изучению квантового хаоса в численных экспериментах.

Данная работа посвящена обсуждению и обоснованию более высокой эффективности спектрального метода (СМ) по сравнению с методом диагонализации (МД) для решения уравнения Шредингера в гладких потенциальных системах, а также дальнейшему развитию методов контроля точности и оптимизации вычислений с помощью квазиклассических методов.

В первом разделе описан МД в базе гармонического осциллятора (ГО), рассмотрен вопрос об оптимизации частоты базиса ГО и о влиянии упорядочения базисных векторов на эффективность метода, проанализирована применимость метода для нескольких двумерных потенциальных систем и продемонстрирована высокая чувствительность МД к форме потенциальной поверхности.

Во втором разделе изложен СМ для решения уравнения Шредингера в потенциалах произвольной размерности и проведен детальный анализ ошибок при вычислениях по СМ. Представлены оригинальные результаты, полученные СМ для эффекта усиленного хаосом динамического туннелирования в двумерных потенциальных системах сложной геометрии.

В третьем разделе проведен сравнительный анализ эффективности МД и СМ для вычислительных задач квантового хаоса и обоснована предпочтительность СМ по сравнению с МД.

В четвертом разделе кратко изложена квазиклассическая теория для плотности и числа состояний в потенциальных системах и продемонстрировано применение соответствующих квазиклассических выражений для оптимизации вычислений и контроля точности полученных результатов.

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА МЕТОДОМ ДИАГОНАЛИЗАЦИИ

Стандартным методом решения квантово-механических задач по-прежнему считается метод диагонализации гамильтониана задачи в базе гармонического осциллятора соответствующей размерности. Ясно, что такой базис может быть построен из произведений волновых функций одномерного ГО:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \partial_x^2 + \frac{\omega^2 x^2}{2} \quad (1)$$

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{e^{-\frac{\xi^2}{2}}}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi), \quad \xi = \sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} x.$$

Рассмотрим применение МД на примере следующих двумерных полиномиальных потенциалов: связанных четвертичных осцилляторов (СЧО)

$$U(x, y; \alpha) = x^4 + y^4 + \alpha x^2 y^2, \quad (2)$$

Барбаниса

$$U(x, y) = \frac{x^2 + y^2}{2} + xy^2, \quad (3)$$

низшей омбиллической катастрофы D_5 (4)

$$U(x, y; a) = ay^2 - x^2 + xy^2 + x^4 / 4. \quad (4)$$

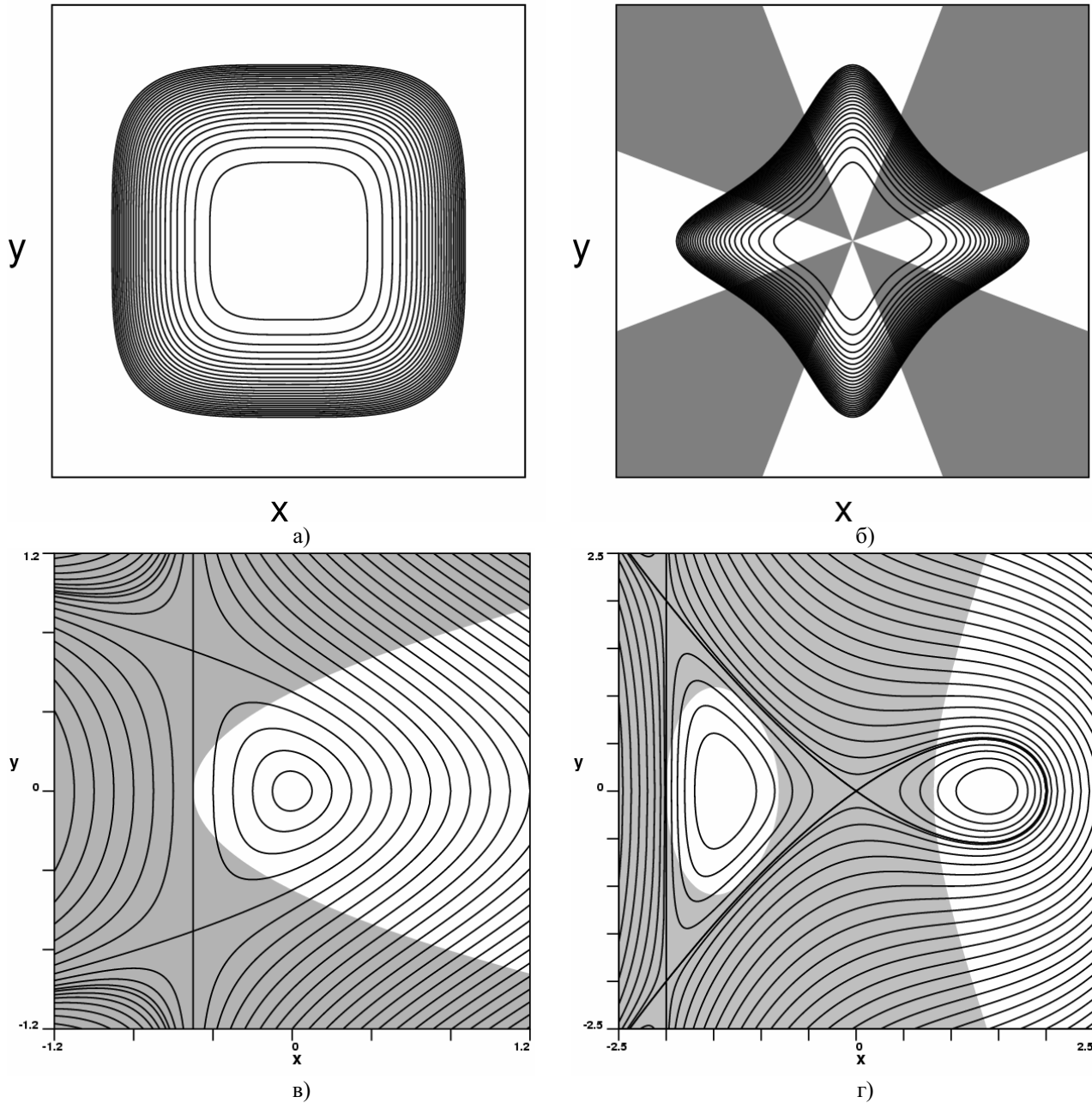


Рис. 1. Линии уровня потенциалов СЧО (2) с $\alpha = 0$ (а) и $\alpha = 19,5$ (б), Барбаниса (3) (в) и потенциала D_5 (4) с $a = 2$ (г). Серым цветом обозначена область отрицательной Гауссовой кривизны поверхности потенциальной энергии.

Двумерный базис, составленный из волновых функций ГО, в самом общем случае можно записать следующим образом:

$$\Psi_{n_x n_y}(x, y) = \frac{(\omega_x \omega_y)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\xi^2 + \eta^2}{2}}}{\sqrt{2^{n_x + n_y} n_x! n_y! \pi \hbar}} H_{n_x}(\xi) H_{n_y}(\eta), \quad (5)$$

$$\xi = \sqrt{\frac{\omega_x}{\hbar}} x, \eta = \sqrt{\frac{\omega_y}{\hbar}} y.$$

В общем случае частоты ω_1 и ω_2 несоизмеримы, и соответствующие уровни энергии

$$E_{n_x n_y} = \hbar \left(\omega_x n_x + \omega_y n_y + \frac{\omega_x + \omega_y}{2} \right) \quad (6)$$

не вырождены, поэтому естественно выстраивать базисные вектора Ψ_{mn} в порядке возрастания энергии. Однако нам удобнее пользоваться базисом изотропного ГО, то есть с $\omega_1 = \omega_2 = \omega$. В этом случае, как известно, n -й уровень энергии

$$E_n = \hbar \omega (n + 1) \quad (7)$$

является n -кратно вырожденным, и вопрос об упорядочении базиса становится не таким очевидным.

Зачастую гамильтониан задачи обладает дискретной симметрией, например, потенциалы Барбаниса и омбиллической катастрофы D_5 обладают четностью по переменной y , а потенциал связанных четвертичных осцилляторов обладает группой симметрии квадрата C_{4v} . В таком случае состояния, соответствующие различным типам симметрии, выгодно находить отдельно по нескольким причинам. Во-первых, для исследования статистических свойств энергетических спектров в квантовой хаологии так или иначе необходимо анализировать состояния с определенным типом симметрии по отдельности. Во-вторых, как правило, состояния с разной симметрией, например, четные и нечетные, являются если не вырожденными, то очень близкими по энергии, как, например, низкоэнергетические состояния в потенциале Барбаниса, поскольку этот потенциал, как и многие другие, вблизи минимума потенциальной энергии весьма близок к потенциалу гармонического осциллятора с соизмеримыми частотами. Таким образом, включение в рассмотрение сразу всех состояний приводит к плохо обусловленным матрицам, а выделение состояний определенного типа заметно улучшает обусловленность. Для потенциалов Барбаниса и омбиллической катастрофы D_5 такое разделение сводится к отдельному рассмотрению состояний с четными и нечетными n_y , а базис для нахождения состояний, например, типа A_1 в потенциале связанных четвертичных осцилляторов строится из симметризованных комбинаций (вида $\Psi_{mn} + \Psi_{nm}$) базисных векторов с четными индексами.

Характерным свойством полиномиальных потенциалов является разреженная ленточная структура соответствующей матрицы (рис. 2). При этом для больших размерностей матрицы n ширина ленты $m \sim 2\sqrt{2n}$ для состояний типа A_1 в потенциале связанных четвертичных осцилляторов, $m \sim 3\sqrt{n}$ и $m \sim 4\sqrt{n}$ для четных состояний в потенциалах Барбаниса и омбиллической катастрофы D_5 . Очевидно, что для полиномиальных потенциалов имеет смысл использовать специальные алгоритмы для диагонализации ленточных матриц, которые работают заметно быстрее диагонализации матриц общего вида той же размерности.

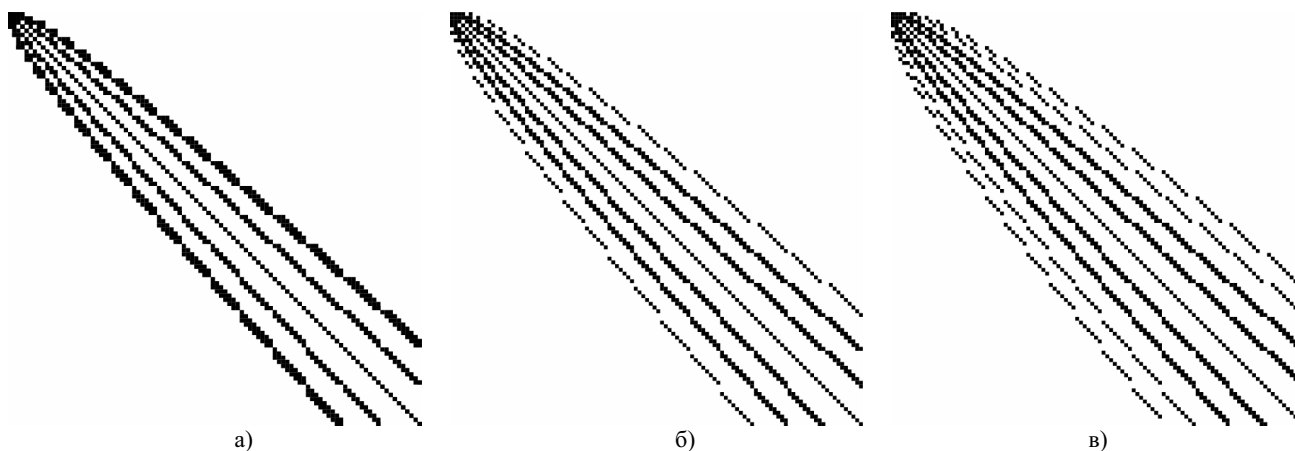


Рис. 2. Распределение ненулевых матричных элементов гамильтониана в базисе ГО для состояний типа A_1 в потенциале СЧО (2) (а), для четных состояний в потенциале Барбаниса (3) (б) и потенциале D_5 (4) (в).

Несложный анализ показывает, что число ненулевых матричных элементов для всех трех рассматриваемых потенциалов не превышает $11n$. Это говорит о том, что использованное нами упорядочение базисных векторов не оптимально, и возможно существование некоторого другого упорядочения, которое привело бы к ленточным матрицам с шириной ленты $m = 5$, или по крайней мере с шириной, гораздо медленнее растущей с размерностью матрицы. Такое оптимальное упорядочение позволило бы заметно ускорить вычисления, однако его поиск является нетривиальной задачей.

Теоретически процедура диагонализации сходится к искомому спектру для любой частоты базиса ω при размерности матрицы, стремящейся к бесконечности. На практике мы всегда имеем дело с матрицами конечной размерности, и результаты вычислений энергетического спектра конкретной задачи заметно зависят от ω (рис. 3).

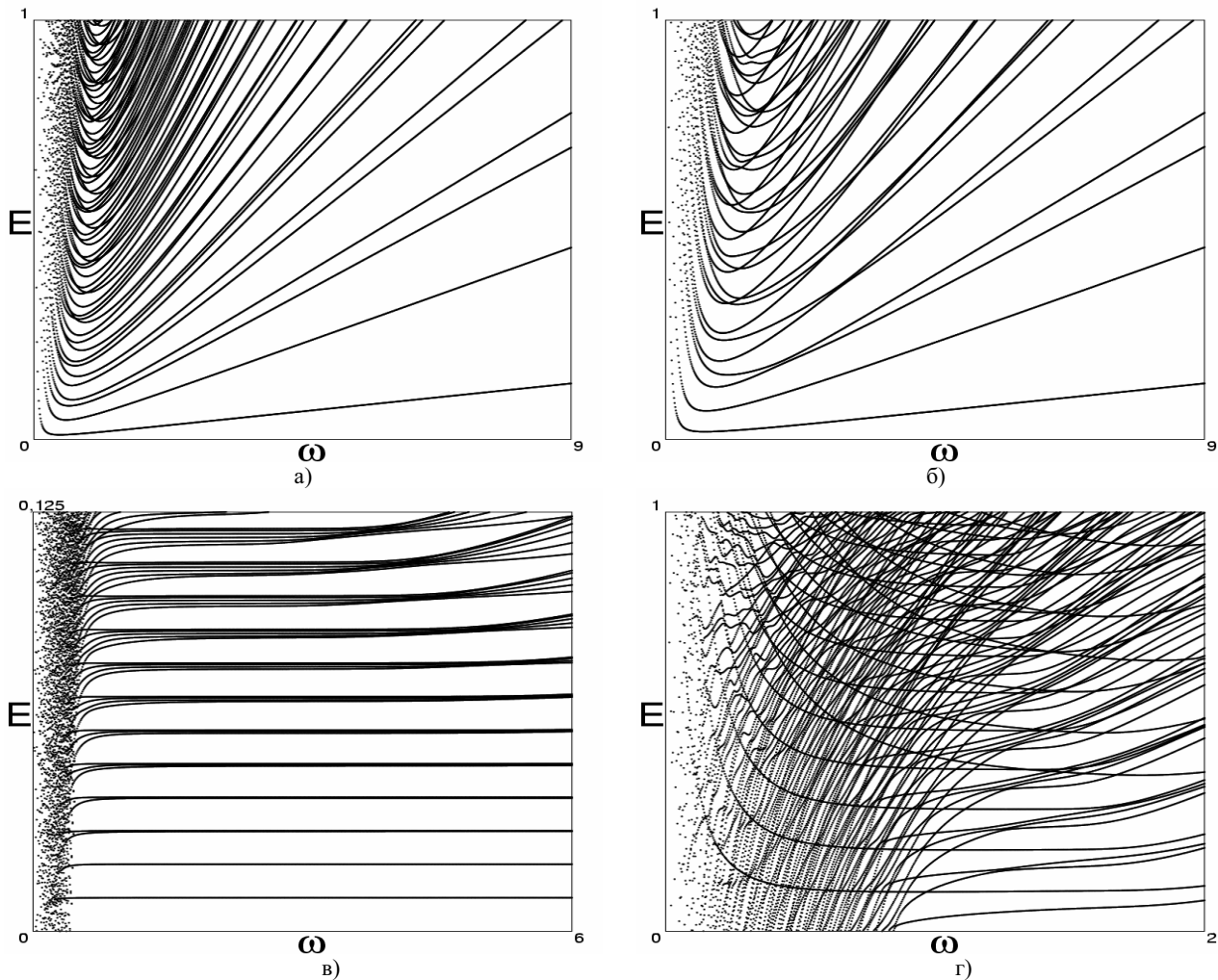


Рис. 3. Зависимость вычисленных энергетических уровней от частоты базиса ω для состояний типа A_1 в потенциале СЧО (2) с $\alpha = 0$ (а) и $\alpha = 19,5$ (б), для четных состояний в потенциале Барбаниса (3) (в) и D_5 (4) с $a = 2$ (г).

Для хорошо определенных потенциалов простой геометрии, каким является одноямный потенциал СЧО, характерно существование минимумов зависимости $E_n(\omega)$ для каждого вычисленного уровня (рис. 3). Этот минимум и определяет оптимальную частоту базиса ω_0 , то есть такую частоту, при которой вычисления дают наиболее стабильный, слабее всего зависящий от малых возмущений базиса, результат (рис. 4).

После того, как оптимальная частота базиса установлена, желаемая точность вычислений может быть достигнута путем увеличения размерности базиса (рис. 5). Как видно из рисунка, оптимальная частота зависит от энергии, однако для интегрируемых систем, таких как потенциал СЧО с $\alpha = 0$ (рис. 3а, 4а), эта зависимость достаточно слабая и позволяет подобрать оптимальную частоту, пригодную для достаточно широкого интервала энергий (в данном случае $\omega_{\text{опт}} \approx 1$). Для более интересных неинтегрируемых, хаотических систем, таких как тот же потенциал СЧО, но с $\alpha = 19,5$, что соответствует развитому динамическому хаосу, зависимость уровней энергии от ω заметно усложняется (рис.3б): для отдельных уровней появляются два и более минимумов на

кривой $E_n(\omega)$ и зависимость $\omega_{\text{опт}}(E)$ уже не является хорошо определенной, достаточно гладкой функцией (рис. 4б). Такое усложнение зависимости $E_n(\omega)$ является одним из универсальных квантовых проявлений классического динамического хаоса. Тем не менее, можно выбрать некую усредненную оптимальную частоту $\omega_{\text{опт}} \approx 1,2$, которая, однако, теперь будет пригодна для нахождения небольшого числа низколежащих уровней, для которых минимумы широки, а зависимость $E_n(\omega)$ еще достаточно слаба.

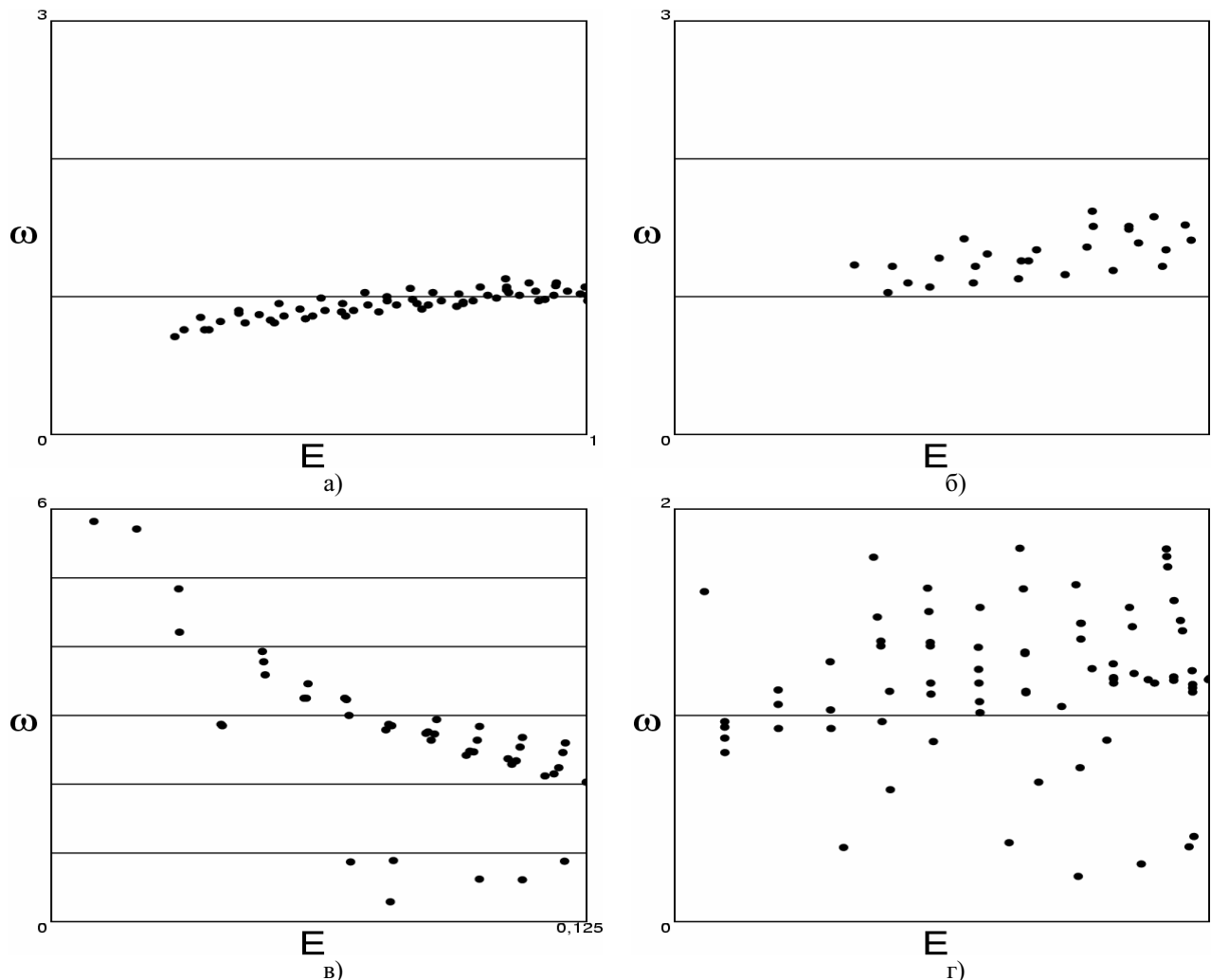


Рис. 4. Оптимальная частота базиса как функция энергии для состояний типа A_1 в потенциале СЧО (2) с $\alpha = 0$ (а) и $\alpha = 19,5$ (б), для четных состояний в потенциале Барбаниса (3) (в) и потенциале D_5 (4) с $a = 2$ (г).

Для потенциала Барбаниса ситуация еще интереснее, поскольку для него минимумы в зависимости $E_n(\omega)$ отсутствуют вовсе. Это объясняется, по-видимому, плохой определенностью этой модели, в отличие от потенциала СЧО, с точки зрения квантовой механики как таковой: потенциал Барбаниса допускает инфинитное движение, поэтому связанные состояния в нем, строго говоря, отсутствуют. Как и в потенциале Хенона-Хейлиса, можно говорить о спектре квазистационарных состояний, благодаря малости туннелирования. Однако туннелирование становится заметным для малых частот базиса ГО («широкие» собственные волновые функции), приводя сперва к убыванию $E_n(\omega)$ и исчезновению минимума, а затем к неустойчивому поведению результатов вычислений. Вместо минимумов зависимости $E_n(\omega)$ в потенциале Барбаниса наблюдаются точки перегиба, имеющие вид достаточно широких плато, сужающихся с ростом энергии (рис.3в). В таком случае оптимальную частоту $\omega_{\text{опт}}$ можно определить из условия минимизации производной $\frac{\partial E_n(\omega)}{\partial \omega}$, что по своему смыслу — стабиль-

ность результатов вычислений — эквивалентно условию минимума $E_n(\omega)$. В результате можно получить достаточно гладкую зависимость $\omega_{\text{опт}}(E)$ (рис.4в), однако в этом случае частоту базиса следует подбирать по верхнему краю исследуемого интервала энергий — $\omega = \omega_{\text{опт}}(E_{\text{max}}) \approx 2$ — поскольку стабильность вычисления более низких уровней будет заведомо лучше. Характерно, что ширина плато заметно отличается для уровней внутри

одной энергетической оболочки (рис. 3в). Это означает, что даже близкие уровни энергии будут вычислены с заметно отличающейся точностью.

Наконец, для потенциалов сложной геометрии, с несколькими локальными минимумами, таких как двумерный потенциал D_5 (рис. 1г), зависимость $E_n(\omega)$ обладает обескураживающей сложностью (рис. 3г), и в этом проявляется сравнительно низкая эффективность метода диагонализации для таких систем. Анализ этой зависимости показывает, что картина (рис. 3г) представляет собой суперпозицию семейств кривых двух различных типов, обязанных своим существованием двум различным минимумам потенциала (в потенциале с большим количеством локальных минимумов таких семейств было бы больше). Кривые одного семейства соответствуют зависимости $E_n(\omega)$ для уровней, происходящих из правого минимума, соответствующего регулярному движению: подобно картине $E_n(\omega)$ для потенциала СЧО, для них наблюдаются хорошо выраженные, широкие минимумы, что позволяет указать оптимальную частоту $\omega_{\text{опт}}$, пригодную для вычисления таких уровней в достаточно широком интервале энергий — и это не смотря на то, что соответствующий этой частоте потенциал гармонического осциллятора весьма далек по форме даже от этого регулярного минимума. Однако выбрать такую частоту для другого семейства кривых $E_n(\omega)$, соответствующих уровням, происходящим из левого — хаотического — уровня гораздо проблематичнее. В общих чертах это семейство кривых $E_n(\omega)$ напоминает ситуацию в потенциале Барбаниса: точки перегиба и плато вместо минимумов, неустойчивое поведение результатов для низких частот базиса как следствие туннелирования. Присутствуют также черты, виденные нами в потенциале СЧО и являющиеся общим свойством хаотических систем — множественные минимумы зависимости $E_n(\omega)$ для высоколежащих уровней. Все это делает нахождение энергетического спектра в многомяных потенциалах технически намного более сложной задачей, чем это было в одномяных потенциалах.

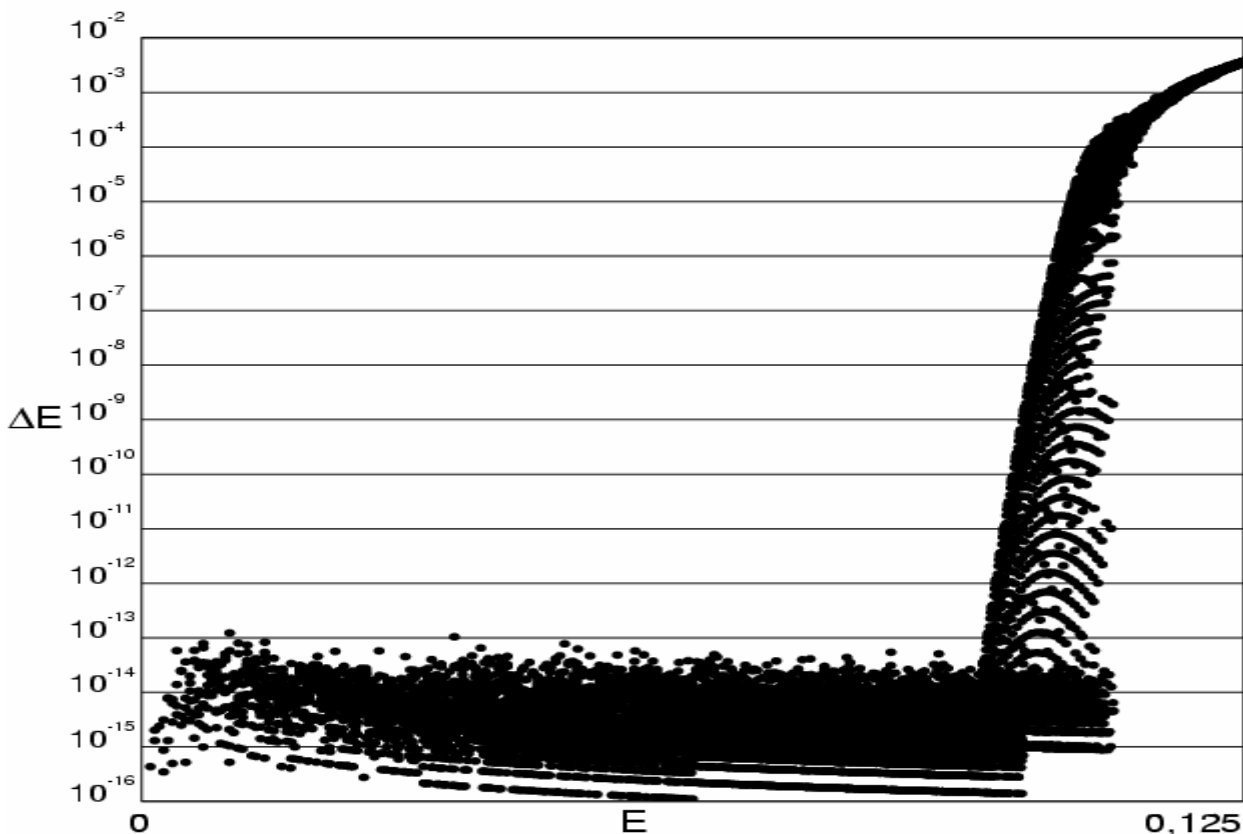


Рис. 5. Разница результатов вычислений энергетического спектра четных состояний для потенциала Барбаниса с размерностями базиса 40401 ($l_{\text{max}} = 400$) и 63001 ($l_{\text{max}} = 500$). Эффективная постоянная планка $\hbar = 5 \cdot 10^{-4}$. Оптимизированная частота базиса гармонического осциллятора $\omega = 1,25$.

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА СПЕКТРАЛЬНЫМ МЕТОДОМ

Кратко изложим схему применения спектрального метода [4] для решения стационарного уравнения Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^D \partial_i^2 + U(x_1, \dots, x_D) \right] \psi_n(x_1, \dots, x_D) = E_n \psi_n(x_1, \dots, x_D), \quad (8)$$

где D – размерность конфигурационного пространства системы. Будем предполагать, что потенциал $U(x_1, \dots, x_D)$ допускает лишь финитное движение для всех энергий. Таким образом, наша задача состоит в нахождении дискретного спектра энергий E_n и стационарных волновых функций $\psi_n(x_1, \dots, x_D)$.

Рассмотрим зависящее от времени решение $\psi(x_1, \dots, x_D; t)$ соответствующего нестационарного уравнения Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^D \partial_i^2 + U(x_1, \dots, x_D) \right] \psi(x_1, \dots, x_D; t) = i\hbar \partial_t \psi(x_1, \dots, x_D; t) \quad (9)$$

с некоторым, вообще говоря, произвольным, начальным условием $\psi_0(x_1, \dots, x_D) = \psi(x_1, \dots, x_D; t=0)$. Имея ввиду разложение

$$\psi_0(x_1, \dots, x_D) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x_1, \dots, x_D) \quad (10)$$

по искомым $\psi_n(x_1, \dots, x_D)$, получаем

$$\psi(x_1, \dots, x_D; t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x_1, \dots, x_D) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}. \quad (11)$$

Здесь и далее мы подразумеваем, что волновые функции $\psi_n(x_1, \dots, x_D)$ образуют ортонормированный базис:

$$\int dx_1 \dots dx_D \bar{\psi}_i(x_1, \dots, x_D) \psi_k(x_1, \dots, x_D) = \delta_{ik}. \quad (12)$$

Рассмотрим корреляционную функцию вида

$$P(t) = \int dx_1 \dots dx_D \bar{\psi}_0(x_1, \dots, x_D) \psi(x_1, \dots, x_D; t) = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}. \quad (13)$$

Волновую функцию начального состояния $\psi_0(x_1, \dots, x_D)$ мы будем также считать нормированной:

$$\int dx_1 \dots dx_D \bar{\psi}_0(x_1, \dots, x_D) \psi_0(x_1, \dots, x_D) = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 = 1, \quad (14)$$

поэтому $P(0) = 1$. Фурье-образ корреляционной функции (13) содержит информацию о спектре энергий E_n :

$$P(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\frac{Et}{\hbar}} P(t) = \hbar \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 \delta(E - E_n). \quad (15)$$

Для нахождения стационарных волновых функций $\psi_n(x_1, \dots, x_D)$ нам понадобится Фурье-образ самой $\psi(x_1, \dots, x_D; t)$:

$$\psi(x_1, \dots, x_D; E) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\frac{Et}{\hbar}} \psi(x_1, \dots, x_D; t) = \hbar \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x_1, \dots, x_D) \delta(E - E_n). \quad (16)$$

На практике, естественно, никогда не возникает вопрос о численном нахождении всех E_n и $\psi_n(x_1, \dots, x_D)$ — обычно речь идет об отыскании всех уровней энергии E_n в заданном интервале $E_1 < E < E_2$ с заданной точностью δ_E и о вычислении соответствующих стационарных волновых функций $\psi_n(x_1, \dots, x_D)$ на некотором множестве точек $x_i^{(k)} = x_{i0}^{(k)} + k\Delta x_i$, $k = 0, N_i$ также с конечной точностью. В дальнейшем мы будем предполагать для удобства, что все N_i равны между собой.

Покажем, как можно применить выражения (13-16) для построения вычислительной процедуры. Очевидно, что при практических вычислениях мы всегда располагаем лишь конечным числом величин, вычисленных также с конечной точностью. В нашем случае это означает, во-первых, что самая важная для нас величина — $\psi(x_1, \dots, x_D; t)$ — будет вычислена в конечном множестве точек как по времени, так и по пространственным координатам. Соответственно и корреляционная функция $P(t)$ будет известна лишь в некоторых точках $t_k = k\Delta t$, $k = 1, M$, поэтому преобразования Фурье по времени (15) и (16) мы будем применять в несколько модифицированном виде:

$$P_T(E) = \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{i\frac{Et}{\hbar}} P(t) = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 \delta_T(E - E_n), \quad (17)$$

$$\psi_T(x_1, \dots, x_D; E) = \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{i\frac{Et}{\hbar}} \psi(x_1, \dots, x_D; t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x_1, \dots, x_D) \delta_T(E - E_n), \quad (18)$$

где $T = M\Delta t$, а конечный аналог дельта-функции приобретает вид:

$$\delta_T(E) = \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{i\frac{Et}{\hbar}} = \frac{e^{i\frac{ET}{\hbar}} - 1}{i\frac{ET}{\hbar}} = f_T\left(\frac{ET}{\hbar}\right) \quad (19)$$

$$f_T(x) = \frac{\sin \pi x}{\pi x} e^{i\pi x}.$$

В отличие от обычной дельта-функции, $\delta_T(0) = 1$ (см. рис. 6).

Таким образом, каждому энергетическому уровню E_n соответствует достаточно острый пик — локальный максимум функции $|P_T(E)|$, расположенный в точке $E = E_n$ (рис. 7).

Типичная функция $|P_T(E)|$ имеет множество локальных максимумов, которые вообще не имеют отношения к уровням энергии исследуемой системы — они связаны с осциллирующим характером $\delta_T(E)$. Так, полное число максимумов $|P_T(E)|$ на рис. 7 равно 94, тогда как ей соответствует всего 9 физических уровней. Таким образом, формально анализируя $|P_T(E)|$, мы будем получать много лишних, паразитных «уровней». Единственный признак, по которому можно отличить такие фиктивные уровни от истинных, это относительная малость $|P_T(E)|$ в соответствующих локальных максимумах. Однако, если мы станем просто игнорировать уровни с $|P_T(E)|$ меньше некоторого порогового значения, мы рискуем потерять некоторые правильные уровни, соответствующие небольшим значениям $|a_n|$.

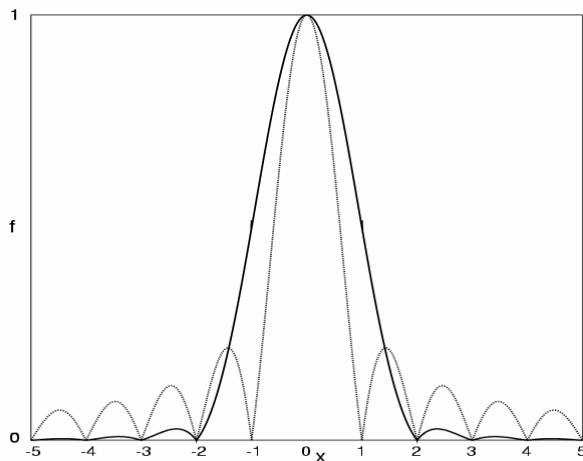


Рис. 6. $|f_T(x)|$ (пунктирная линия) и $|f_h(x)|$ (сплошная линия) для $-5 < x < 5$.

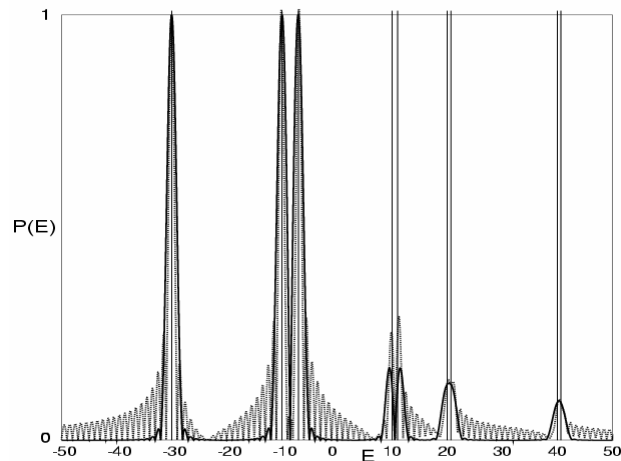


Рис. 7. $|P_T(E)|$ (пунктирная линия) и $|P_h(E)|$ (сплошная линия) модельной системы со спектром энергий $E_{1,2,9} = \{-30, -10, -7, 10, 11, 20, 20, 7, 40, 40, 63\}$ (вертикальные линии) для $-50 < E < 50$ при $h = T = 1$.

В связи с этим оказывается весьма полезным взвешенное преобразование Фурье:

$$P_w(E) = \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{i\frac{Et}{\hbar}} P(t) w(t) = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 \delta_w(E - E_n), \quad (20)$$

$$\psi_w(x_1, \dots, x_D; E) = \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{i\frac{Et}{\hbar}} \psi(x_1, \dots, x_D; t) w(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x_1, \dots, x_D) \delta_w(E - E_n), \quad (21)$$

$$\delta_w(E) = \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{i\frac{Et}{\hbar}} w(t), \quad (22)$$

где весовая функция $w(t)$ удовлетворяет условиям:

$$w(0) = w(T) = 0, \quad \int_0^T w(t) dt = 1. \quad (23)$$

Таким образом, $\delta_H(0) = 1$ для любой такой $w(t)$. Простейшей функцией, удовлетворяющей условиям (23), является функция Ханнинга $w(t) = 1 - \cos(2\pi t/T)$, для которой

$$\delta_H(E) = \frac{e^{i\frac{ET}{\hbar}} - 1}{i\frac{ET}{\hbar}} - \frac{1}{2} \left[\frac{e^{i\left(\frac{ET}{\hbar} + 2\pi\right)} - 1}{i\left(\frac{ET}{\hbar} + 2\pi\right)} + \frac{e^{i\left(\frac{ET}{\hbar} - 2\pi\right)} - 1}{i\left(\frac{ET}{\hbar} - 2\pi\right)} \right] = f_H\left(\frac{ET}{\hbar}\right), \quad (24)$$

$$f_H(x) = \frac{\sin(\pi x) e^{i\pi x}}{\pi x (1 - x^2)} = \frac{f_T(x)}{1 - x^2}. \quad (25)$$

Введение весовой функции в модифицированное преобразование Фурье позволяет заметно уменьшить носительную амплитуду фиктивных пиков в $|P_H(E)|$ (рис. 6), и даже несколько уменьшить их количество — до 76 для $|P_H(E)|$ вместо 86 для $|P_T(E)|$ (рис. 7). Численный анализ кривой $|f_T(x)|$ показывает, что второй по величине максимум расположен в точках $x_{T\max} \approx \pm 1,43$ и имеет амплитуду $f_{T\max} \approx 0,217$, в то время как для кривой $|f_H(x)|$ аналогичный максимум расположен почти вдвое дальше от основного — $x_{H\max} \approx \pm 2,36$, а его амплитуда оказывается на порядок меньшей — $f_{T\max} \approx 0,0267$. Амплитуда более удаленных максимумов $|f_H(x)|$ убывает по сравнению с аналогичными $|f_T(x)|$ еще быстрее (рис. 6).

Анализируя положения локальных максимумов $|P_H(E)|$, можно определить сами уровни энергии E_n , а также абсолютные величины коэффициентов a_n :

$$|a_n| = \sqrt{P_H(E_n)}. \quad (26)$$

Если теперь в выражении

$$\psi_H(x_1, \dots, x_D; E_n) = a_n \psi_n(x_1, \dots, x_D) + \sum_{k \neq n} a_k \psi_k(x_1, \dots, x_D) \delta_H(E_n - E_k) \quad (27)$$

пренебречь суммой, содержащей $\delta_H(E_n - E_k)$ (ср.(21)), то с точностью до фазового множителя собственные волновые функции определяются выражением:

$$\psi_n(x_1, \dots, x_D) = \frac{1}{|a_n|} \psi_H(x_1, \dots, x_D; E_n). \quad (28)$$

Здесь и далее мы считаем, что среди уровней E_n нет вырожденных. Фактически в любой системе с вырожденными уровнями можно (и нужно) избавиться от вырождения надлежащим выбором начального состояния.

Однако такой подход применим лишь в том случае, когда данный уровень энергии E_n достаточно удален от остальных. Действительно, если два или более уровней расположены слишком близко друг к другу, то положение соответствующих максимумов $|P_H(E)|$ заметно отличается от значений E_n . Более того, для достаточно близких уровней $|P_H(E)|$ будет иметь всего один общий пик (рис. 7). В общем случае не представляется возможным точно определить минимальное расстояние между близкими уровнями, при котором они могут быть разрешены, однако можно с уверенностью утверждать, что эта величина порядка $\Delta E_{\min} = \hbar/T$ — «естественной ширины» уровня. Таким образом, дублетам и мультиплетам с расщеплением менее ΔE_{\min} будет соответ-

вовать всего один локальный максимум, и в вычисленном спектре некоторых уровней будет не хватать (см. таблицу).

Таблица. Спектр энергий и амплитуды собственных состояний модельной системы со спектром энергий $E_{1,2,\dots,9} = \{-30, -10, -7, 10, 11, 20, 20.7, 40, 40.63\}$ и $a_{1,2,\dots,9} = \{0.5, 0.5, 0.5, 0.25, 0.25, 0.2, 0.2, 0.15, 0.15\}$.

	E_1	$ a_1 $	E_2	$ a_2 $	E_3	$ a_3 $
Точно	-30,00	0,50	-10,00	0,50	-7,00	0,50
Из $ P_T(E) $	-30,03	0,50	-10,09	0,50	-6,91	0,50
Из $ P_H(E) $	-30,00	0,50	-9,97	0,50	-7,03	0,50
	E_4	$ a_4 $	E_5	$ a_5 $	E_6	$ a_6 $
Точно	10,00	0,25	11,00	0,25	20,00	0,20
Из $ P_T(E) $	9,89	0,25	11,24	0,27	20,22	0,19
Из $ P_H(E) $	9,53	0,21	11,47	0,21	20,35	0,18
	E_7	$ a_7 $	E_8	$ a_8 $	E_9	$ a_9 $
Точно	20,70	0,20	40,00	0,15	40,63	0,15
Из $ P_T(E) $	21,10	0,19	40,32	0,16	-	-
Из $ P_H(E) $	-	-	40,31	0,15	-	-

Из таблицы видно, что анализ $|P_H(E)|$ дает заметно более точные результаты для изолированных уровней. С другой стороны, $|P_T(E)|$ обладает меньшей естественной шириной уровня и дает более адекватные результаты для близких уровней. Однако преимущество $|P_T(E)|$ в разрешении близких уровней настолько мало, что $|P_H(E)|$ оказывается предпочтительнее в большинстве случаев.

Учитывая, что $P(t)$, как и $\psi(x_1, \dots, x_D; t)$, известно лишь на конечном множестве точек $t_k = k\Delta t, k = 0, M$, самым естественным способом получения $P_H(E)$ будет дискретное преобразование Фурье:

$$P_H(E_k) = \frac{1}{M} \sum_{j=0}^M P(t_j) w(t_j) e^{2\pi i \frac{jk}{M}} = \frac{\Delta t}{T} \sum_{j=0}^M P(t_j) w(t_j) e^{i \frac{t_j E_k}{\hbar}}, \quad (29)$$

где $E_k = \frac{\hbar}{T} k, k = -M/2, M/2$. Таким образом, $P_H(E)$ оказывается вычисленной в интервале энергий $-\frac{\hbar}{2\Delta t} < E < \frac{\hbar}{2\Delta t}$ с шагом $\Delta E = \hbar/T$, равным как раз «естественной ширине» уровня.

Поскольку $w(T) = w(0) = 0$, то дискретное преобразование Фурье (29) фактически совпадает с формулой численного интегрирования по методу трапеций [5], примененной к (13), и нетрудно оценить ее погрешность:

$$R_H(E) = \frac{T\Delta t^2}{12} \left| \frac{d^2}{dt^2} \left(P(t) w(t) e^{i \frac{Et}{\hbar}} \right) \right|_{t=\tau}, \quad (30)$$

где $0 < \tau < T$. Но

$$\begin{aligned}
& \left| \frac{d^2}{dt^2} \left(P(t) w(t) e^{\frac{iEt}{\hbar}} \right) \right| = \left| \frac{d^2}{dt^2} \left(\sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 \left(e^{\frac{2\pi i t}{\hbar} (E-E_n)} - \frac{1}{2} e^{\frac{2\pi i t}{\hbar} (E-E_n + \frac{\hbar}{T})} - \frac{1}{2} e^{\frac{2\pi i t}{\hbar} (E-E_n - \frac{\hbar}{T})} \right) \right) \right| \leq \\
& \leq \frac{1}{\hbar^2} \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 \left| (E-E_n)^2 e^{\frac{2\pi i t}{\hbar} (E-E_n)} - \frac{(E-E_n + \frac{\hbar}{T})^2}{2} e^{\frac{2\pi i t}{\hbar} (E-E_n + \frac{\hbar}{T})} - \frac{(E-E_n - \frac{\hbar}{T})^2}{2} e^{\frac{2\pi i t}{\hbar} (E-E_n - \frac{\hbar}{T})} \right| \leq \\
& \leq \frac{1}{\hbar^2} \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 \left((E-E_n)^2 + \frac{(E-E_n + \frac{\hbar}{T})^2}{2} + \frac{(E-E_n - \frac{\hbar}{T})^2}{2} \right) = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 \left(\frac{2(E-E_n)^2}{\hbar^2} + \left(\frac{2\pi}{T} \right)^2 \right) = \\
& = \frac{2(E-\bar{E})^2}{\hbar^2} + 2 \left(\frac{D_E}{\hbar} \right)^2 + \left(\frac{2\pi}{T} \right)^2,
\end{aligned} \tag{31}$$

где \bar{E} и D_E — соответственно средняя энергия и дисперсия энергии в начальном состоянии $\psi_0(x_1, \dots, x_D)$:

$$\begin{aligned}
\bar{E} &= \int dx_1 \dots dx_D \bar{\psi}_0(x_1, \dots, x_D) \hat{H} \psi_0(x_1, \dots, x_D) = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 E_n \\
D_E^2 &= \int dx_1 \dots dx_D \bar{\psi}_0(x_1, \dots, x_D) (\hat{H} - \bar{E})^2 \psi_0(x_1, \dots, x_D) = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 E_n^2 - \bar{E}^2 \\
\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^D \partial_i^2 + U(x_1, \dots, x_D),
\end{aligned} \tag{32}$$

и окончательно получаем:

$$R_H(E) \leq \frac{T \Delta t^2}{6 \hbar^2} \left((E - \bar{E})^2 + D_E^2 \right) + \frac{\pi^2 \Delta t^2}{3T}. \tag{33}$$

Таким образом, формально численное интегрирование в (13) позволяет вычислить $P_H(E)$ для любых значений энергии, но фактически область применимости такого подхода ограничена областью энергий $|E - \bar{E}| \ll \frac{\hbar^2}{\Delta t^2}$, что заведомо не лучше, чем для формулы (22). Применение формул приближенного интегрирования более высокого порядка также не даст улучшения по сравнению (22), поскольку для метода численного интегрирования (13) n -го порядка оценка погрешности результата будет иметь вид:

$$R_H^{(n)}(E) \sim \frac{T \Delta t^n}{n! \hbar^n} (E - \bar{E})^n. \tag{34}$$

Для вычисления $\psi(x_1, \dots, x_D; t)$ при $t_k = k \Delta t, k = 1, M$ можно применять пошаговый метод разделенных операторов:

$$\psi(x_1, \dots, x_D; t + \Delta t) = e^{\frac{i \hbar^2 \Delta t}{4} \sum_{i=1}^D \partial_i^2} e^{-i \Delta t U(x_1, \dots, x_D)} e^{\frac{i \hbar^2 \Delta t}{4} \sum_{i=1}^D \partial_i^2} \psi(x_1, \dots, x_D; t) + O(\Delta t^3). \tag{35}$$

Действие дифференциального оператора $e^{\frac{i \hbar^2 \Delta t}{4} \sum_{i=1}^D \partial_i^2}$ находится с помощью дискретного преобразования Фурье:

$$\begin{aligned}
e^{\frac{i \hbar^2 \Delta t}{4} \sum_{i=1}^D \partial_i^2} \psi(x_1, \dots, x_D; t) &= \sum_{n_1=-N_1/2+1}^{N_1/2} \sum_{n_2=-N_2/2+1}^{N_2/2} \dots \sum_{n_D=-N_D/2+1}^{N_D/2} \psi_{n_1 n_2 \dots n_D}(t) e^{\sum_{k=1}^D \left(2\pi i \frac{n_k x_k}{N_k \Delta x_k} - i \Delta t \left(\frac{\hbar n_k}{2 N_k \Delta x_k} \right)^2 \right)} \\
\psi_{n_1 n_2 \dots n_D}(t) &= \frac{1}{\prod_{k=1}^D N_k} \sum_{n_1=-N_1/2+1}^{N_1/2} \sum_{n_2=-N_2/2+1}^{N_2/2} \dots \sum_{n_D=-N_D/2+1}^{N_D/2} \psi(x_1, \dots, x_D; t) e^{-2\pi i \sum_{k=1}^D \frac{n_k x_k}{N_k \Delta x_k}}.
\end{aligned} \tag{36}$$

Рассмотрим применение СМ к двумерному потенциалу квадрупольных поверхностных колебаний атомного ядра [6-12]:

$$U_{QO}(x, y; W) = \frac{1}{2W}(x^2 + y^2) + xy^2 - \frac{1}{3}x^3 + (x^2 + y^2)^2. \quad (37)$$

При значении параметра $W = 18$ поверхность потенциальной энергии (30) обладает четырьмя локальными минимумами, при этом в определенном интервале энергий движение носит стохастический характер в центральном минимуме и регулярный — в остальных (рис. 8).

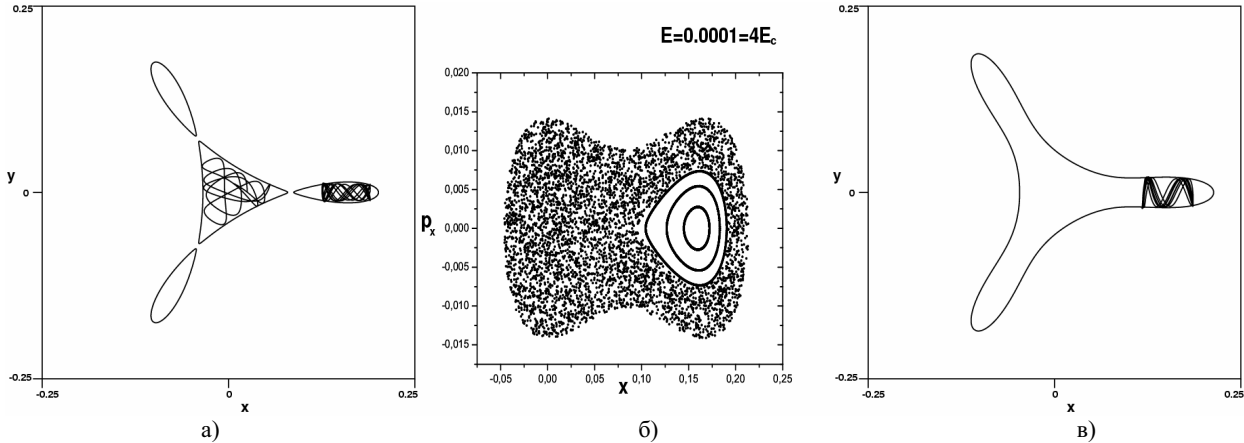


Рис. 8. Регулярная и хаотическая траектории для энергии, близкой к седловой снизу (а), сечение Пуанкаре (б) и квазипериодическая траектория (в), соответствующая острову стабильности для энергии, превосходящей седловую в потенциале (37).

При энергиях движения, в существенно превосходящих седловую, хаотическая динамика наблюдается во всех локальных минимумах, однако в периферийных минимумах сохраняются острова стабильности (рис. 8), соответствующие квазипериодическому движению, локализованному в этих минимумах.

С помощью СМ нетрудно изучить квантовый аналог такой квазипериодической траектории. Для этого следует выбрать начальное состояние $\psi_0(x, y)$ в виде гауссова волнового пакета минимальной неопределенности:

$$\psi_G(x, y) = \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2} - i \frac{p_x(x - x_0)}{\hbar} - i \frac{p_y(y - y_0)}{\hbar} \right]. \quad (38)$$

При этом параметры x_0, y_0, p_x, p_y следует выбрать так, чтобы они совпадали с классическими начальными условиями, дающими квазипериодическое движение (рис.8). В результате временная динамика такого квантового волнового пакета будет с хорошей точностью имитировать движение по соответствующей классической траектории (рис.9).

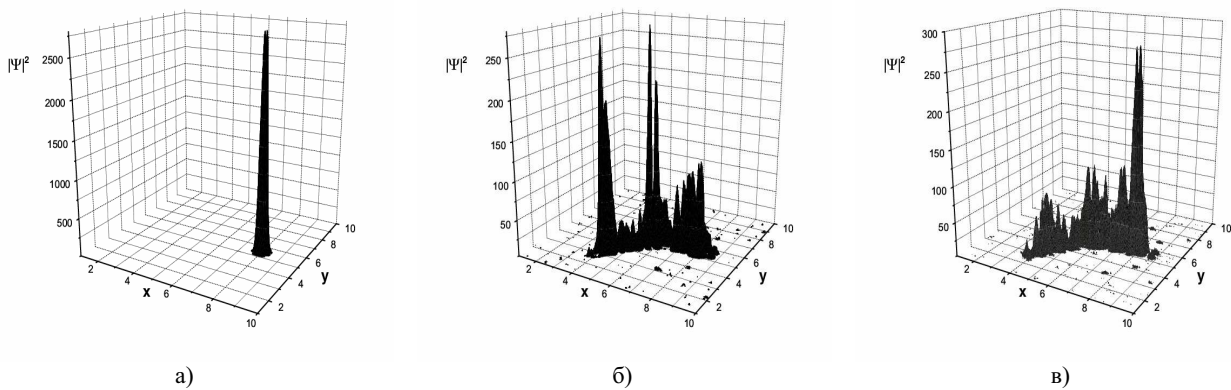


Рис. 9. Профиль гауссова волнового пакета (38) при динамическом туннелировании в потенциале (37): $t = 0$ (а), $t = 5 \cdot 10^7$ (б) и $t = 10^8$ (в).

Основная особенность квантовой динамики будет в появлении динамического туннелирования — перехода квантовой частицы с одного острова стабильности на другой — процесса, запрещенного классической механикой. Динамическое туннелирование оказывается возможным благодаря существованию в хаотических системах туннельных триплетов (рис. 10).

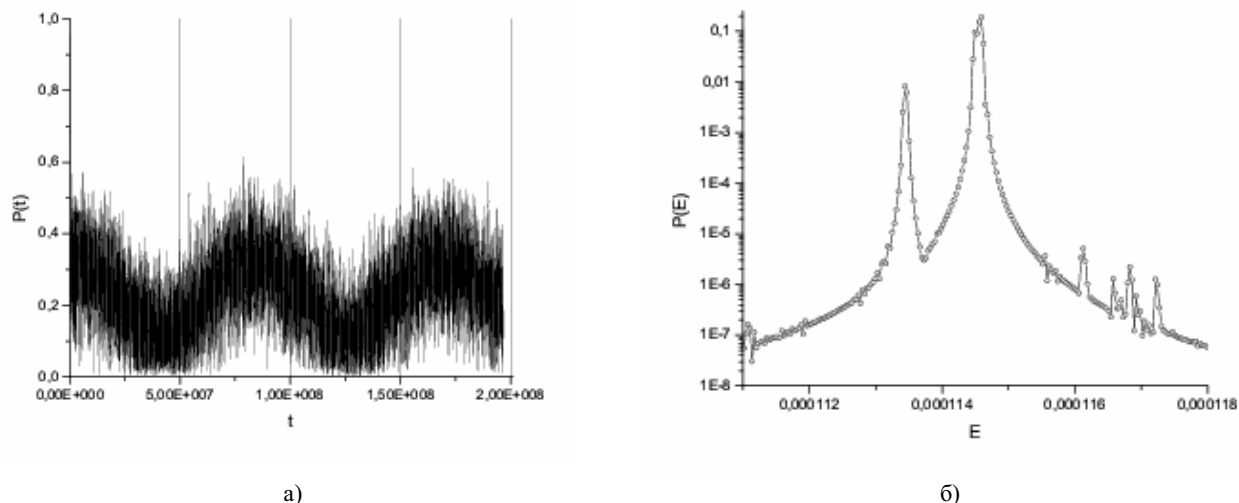


Рис. 10. Корреляционная функция (13) гауссова волнового пакета (38) (а) и туннельный триплет, ответственный за динамическое туннелирование в потенциале (37) (б).

Характерным свойством волновых функций, составляющих туннельный триплет (рис.8), является то, что две из них локализованы на острове стабильности и фактически образуют обычный туннельный дублет, тогда как третья всегда локализована преимущественно в хаотическом море — она и обеспечивает туннелирование, усиленное хаосом [13].

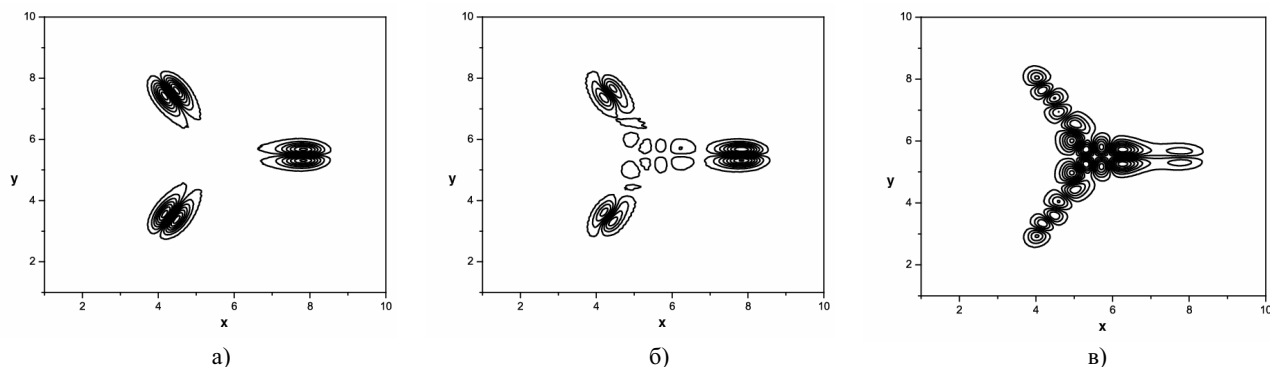


Рис. 11. Плотность вероятности волновых функций, составляющих туннельный триплет, локализованных на островах стабильности (а, б) и в хаотическом море (в).

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРЕИМУЩЕСТВ И НЕДОСТАТКОВ МЕТОДА ДИАГОНАЛИЗАЦИИ И СПЕКТРАЛЬНОГО МЕТОДА РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Метод диагонализации гамильтониана является наиболее традиционным способом численного решения уравнения Шредингера. В свою очередь СМ решения той же задачи представляет собой более новый и во многих отношениях более предпочтительный подход.

Одним из самых фундаментальных недостатков МД следует считать весьма небогатый выбор точно решаемых моделей, собственные волновые функции которых могут быть выбраны в качестве базиса для последующей диагонализации гамильтониана исходной системы. Для динамических систем с гладкими потенциалами такой выбор фактически ограничен одной единственной возможностью — базисом ГО. Свойства симметрии гамильтониана задачи, как правило, накладывают довольно жесткие ограничения на положение начала координат вспомогательного базиса ГО, а в случае размерности задачи более единицы — и на соотношения его частот по разным степеням свободы. Поэтому в большинстве случаев использования МД в распоряжении вычислителя остаются всего два свободных параметра — частота ω и размерность N вспомогательного базиса ГО соответ-

ствующей размерности. Далее остается лишь выбрать частоту ω , оптимальную для данной задачи, и определить минимальную размерность n , достаточную для достижения желаемой точности результата. Такая простота МД является преимуществом, особенно для начинающих вычислителей. Большим удобством является также наличие хорошо разработанных, эффективных библиотечных подпрограмм, позволяющих получать как собственные значения, так и собственные векторы, так что самому исследователю остается лишь вычислить матричные элементы гамильтониана своей задачи. Поскольку любые достоинства, доведенные до крайности, становятся недостатками, то такая предельная простота метода приводит к его недостаточной гибкости: фактически МД хорошо оправдывает себя лишь для таких потенциалов, которые могут быть достаточно хорошо аппроксимированы, хотя бы локально, некоторой квадратичной функцией — потенциалом ГО. Однако такому ограничению не удовлетворяют многие важные потенциалы, например, потенциал СЧО, не говоря уже о потенциалах с несколькими локальными минимумами.

СМ в качестве естественного базиса использует волновые функции свободной частицы — такой базис одинаково хорош, или скорее одинаково плох, для потенциалов любого вида. Эта фундаментальная безразличность СМ к форме потенциальной поверхности системы является основной причиной его универсальности. По сравнению с МД в СМ гораздо больше гибкости — во власти вычислителя находится выбор размера и шага вычислительной сетки как по времени (T и Δt), так и по всем координатам независимо (L_i и Δx_i). В то же время выбор числа узлов сетки N_i ограничен требованием эффективности вычислений: условие применимости алгоритма быстрого преобразования Фурье — главной предпосылки быстроты СМ — предполагает, что все N_i не содержат больших простых делителей, в идеале они должны являться степенями двойки ($N_i = 2^{k_i}$). Наконец, наибольший произвол заключен в выборе начального состояния для вычислений по СМ. Поскольку затруднительно дать сколько-нибудь общие рекомендации на этот счет, то вычисления с использованием СМ из ремесла превращаются в настоящее искусство, требующее большого опыта и постоянной практики. Поскольку СМ до сих пор не считается стандартным, то единственным готовым ингредиентом для его реализации можно назвать общеизвестный алгоритм быстрого преобразования Фурье, реализованный в целом ряде общедоступных библиотечных подпрограмм. Остальные этапы вычислений требуют кропотливой, хотя и принципиально несложной, самостоятельной разработки программного обеспечения. С другой стороны, сам алгоритм СМ может быть легко обобщен на задачи произвольной размерности, чего нельзя сказать о МД — разумное построение базиса конечной размерности из собственных состояний многомерного ГО является нетривиальной задачей ввиду важной проблемы упорядочения базисных векторов.

Количественной мерой эффективности вычислительного метода является быстрота увеличения вычислительных затрат — времени вычислений и объема используемой оперативной памяти — с ростом объема требуемых результатов. Полезно сравнить эффективность СМ и МД при вычислении N уровней энергии системы с заданной точностью ε . Учитывая тот факт, что при изучении статистических свойств вычисленный спектр неизбежно подвергается процедуре разворачивания, разумно определить точность как максимальное отношение абсолютной погрешности вычисленных уровней энергии к среднему расстоянию между этими уровнями:

$$\varepsilon = \frac{\delta_E}{\Delta E} = \rho(E)\delta_E. \quad (39)$$

Для большинства потенциальных систем плотность состояний $\rho(E)$ достаточно быстро растет с энергией:

$$\rho(E) \sim E^{\lambda D - 1}, \quad (40)$$

где D - размерность системы, а λ - величина, близкая к единице (она точно равна единице для ГО). Поэтому условие достижения требуемой точности будет наиболее критично для уровней с наибольшей энергией, а низшие уровни будут получены с завышенной точностью — это досадное неудобство определяется самой природой гладких потенциальных систем, и его в равной мере разделяют оба рассматриваемых метода.

Для МД абсолютная погрешность монотонно растет с номером вычисленного уровня $\delta_E \sim (n/N)^\alpha$, поэтому для наивысших уровней будет $\varepsilon \sim E^{\lambda D - 1} (N/n)^\alpha \sim N^{\alpha - 1(\lambda D)} / n^\alpha$. Отсюда для требуемой размерности базиса имеем: $n \sim N^{1 - \frac{1}{\alpha \lambda}} / \varepsilon^{1/\alpha}$. В общем случае время диагонализации растет как $T_D \sim n^3$, а занимаемая память как $M_D \sim n^2$. Однако во многих важных частных случаях, например, для полиномиальных потенциалов, применение МД приводит к ленточным матрицам, в этом случае $T_{DB} \sim n^2$, а $M_{DB} \sim n$.

В СМ точность вычислений определяется размером вычислительной сетки по времени: $\delta_E \sim 1/T$, а шаг вычислений определяет ширину полосы спектра, в которой удастся найти уровни: $\Delta t \sim 1/\Delta E \sim N^{-1(\lambda D)}$, по-

этому требуемое число шагов по времени $N_T = T / \Delta t \sim \frac{N}{\varepsilon}$, а при заданной точности требуемое число узлов

по координатам будет $N_i \sim N^{\frac{1}{2\lambda D}}$. При этом время счета $T_{SM} \sim N_T N_i^D \ln N_i \sim N^{1+\frac{1}{2\lambda}} \ln N / \varepsilon$, а расход оперативной памяти $M_{SM} \sim N_i^D \sim N^{\frac{1}{2\lambda}}$. Таким образом, СМ, вообще говоря, является более экономичным с точки зрения затрат оперативной памяти и более эффективным с точки зрения скорости вычислений.

К достоинствам СМ следует отнести также то обстоятельство, что численное моделирование временной динамики волновых пакетов входит в алгоритм метода как вспомогательная процедура. В некоторых важных приложениях такое моделирование является основной задачей, тогда как нахождение самих уровней энергии и собственных волновых функций не требуется. В таких случаях важным преимуществом СМ является возможность достичь конечной цели кратчайшим путем, тогда как получение тех же результатов МД потребовало бы несравнимо больше усилий.

КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ ВЫРАЖЕНИЯ ДЛЯ ПЛОТНОСТИ И ЧИСЛА СОСТОЯНИЙ

Уже по своему определению «статистические свойства» подразумевают анализ выборки из достаточно большого числа квантовых состояний. Кажется очевидным, хотя это далеко не всегда так, что речь идет о изучении семейства стационарных состояний некоторой определенной физической системы. В этом случае уже само рассмотрение большого числа состояний, как правило, означает применимость квазиклассического подхода, который, как известно, имеет фактически столь же долгую и богатую историю, как и сама квантовая механика.

Квазиклассические приближения для плотности состояний

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n), \quad (41)$$

где E_n – стационарные уровни энергии, и в особенности ступенчатой функции числа состояний

$$n(E) = \int_{-\infty}^E dE \rho(E) = \sum_n \Theta(E - E_n) \quad (42)$$

в оказываются весьма полезны для различных приложений.

В квазиклассическом приближении принято рассматривать отдельно так называемые гладкую и осциллирующую составляющие функций (41) и (42):

$$\rho(E) = \bar{\rho}(E) + \tilde{\rho}(E), \quad n(E) = \bar{n}(E) + \tilde{n}(E). \quad (43)$$

Гладкая составляющая $\bar{\rho}(E)$ описывает плавное изменение средней плотности состояний с ростом энергии, а осциллирующая составляющая $\tilde{\rho}(E)$ описывает отклонение спектра от «квазиэквидистантного» с расстоянием между соседними уровнями, равным $\Delta(E) = 1 / \bar{\rho}(E)$. В настоящее время существуют весьма развитые методы для получения квазиклассических приближений (обычно речь идет об асимптотическом разложении по степеням \hbar) как для $\bar{\rho}(E)$, так и для $\tilde{\rho}(E)$. Мы оставим без внимания последнюю, ограничившись лишь упоминанием о том, что квазиклассические выражения для $\tilde{\rho}(E)$ в общем случае были получены сравнительно недавно и представляют собой одно из самых крупных достижений квазиклассики несмотря на большую трудность их практического применения. Напротив, квазиклассические приближения для гладких составляющих $\bar{\rho}(E)$ и $\bar{n}(E)$ (в дальнейшем, для простоты, мы будем опускать черту над символом) известны уже давно и гораздо проще в применении. Общеизвестны формулы Томаса-Ферми, которые представляют собой ни что иное, как нулевое приближение для соответствующих величин:

$$\rho_{TF}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \int dpdq \delta(E - H(p, q)), \quad (44)$$

$$n_{TF}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \int dpdq \Theta(E - H(p, q)),$$

где D – размерность конфигурационного пространства. Как правило, при рассмотрении квантового хаоса имеют дело с не слишком экзотическими гамильтонианами, в которых импульс входит аддитивно в квадратичной форме (удобно работать в безразмерных переменных, где масса равна единице):

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2} + U(q). \quad (45)$$

Выполнив интегрирование по импульсным переменным в (44), получим для случая $D = 2$ (в дальнейшем мы ограничимся рассмотрением исключительно двумерных систем):

$$\begin{aligned}\rho_{TF}(E) &= \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int dx dy \Theta(E - U(x, y)), \\ n_{TF}(E) &= \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int dx dy (E - U(x, y)) \Theta(E - U(x, y)).\end{aligned}\quad (46)$$

Видно, что Томас-Фермиевская плотность состояний в двумерных динамических системах является убывающей функцией (постоянной для бильярдов и возрастающей для потенциалов).

Зачастую гамильтониан задачи, или, иначе, потенциал $U(x, y)$, оказываются инвариантны относительно некоторого дискретного преобразования симметрии, например, обладают четностью. (Наличие непрерывной группы симметрии в двумерных динамических системах не представляет интереса с точки зрения квантового хаоса, поскольку означает существование дополнительного к энергии интеграла движения и, соответственно, интегрируемость задачи делает невозможным динамический хаос). Определенная симметрия гамильтониана не только позволяет свести интегрирование по всей плоскости (x, y) в (46) к интегрированию по некоторой области, что иногда заметно упрощает задачу. Гораздо важнее другое: при наличии определенной симметрии гамильтониана, как известно, квантовые состояния системы распадаются на подмножества с определенной симметрией, например, на четные и нечетные. Поскольку состояния разных типов являются статистически независимыми, то при исследовании статистических свойств квантовых состояний в таких системах необходимо рассматривать различные типы симметрии отдельно, для чего нужно знать квазиклассические выражения для «парциальных» плотности $\rho^\lambda(E)$ и числа $n^\lambda(E)$ состояний, где индекс λ нумерует тип состояния. На этот счет также существует исчерпывающая квазиклассическая теория [14], однако зачастую для конкретных задач проще заново получить соответствующие формулы в частном случае. Например, в простейшем случае дискретной симметрии — инвариантности гамильтониана относительно замены $y \rightarrow -y$ — легко получить Томас-Фермиевские выражения, аналогичные (46), отдельно для нечетных состояний. Действительно, волновые функции, нечетные по y , очевидно, являются решением уравнения Шредингера с потенциалом, который отличается от исходного наличием бесконечно высокого, непроницаемого потенциального барьера, расположенного в плоскости $y = 0$. Эффективно такая непроницаемая потенциальная стенка ровно вдвое уменьшает область допустимого фазового пространства, и мы получаем

$$\begin{aligned}\rho_{TF}^{odd}(E) &= \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int_{y>0} dx dy \Theta(E - U(x, y)), \\ n_{TF}^{odd}(E) &= \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int_{y>0} dx dy (E - U(x, y)) \Theta(E - U(x, y)), \\ \rho_{TF}^{even} &= \rho_{TF} - \rho_{TF}^{odd}, \quad n_{TF}^{even} = n_{TF} - n_{TF}^{odd}.\end{aligned}\quad (47)$$

Для нулевого, Томас-Фермиевского, приближения, мы получим тривиальный результат

$$\begin{aligned}\rho_{TF}^{even} &= \rho_{TF}^{odd} = \rho_{TF} / 2, \\ n_{TF}^{even} &= n_{TF}^{odd} = n_{TF} / 2.\end{aligned}\quad (48)$$

Однако сам подход такого симметричного разложения сохраняет свою силу и в более высоких порядках по \hbar , где он приводит к уже нетривиальным результатам. Подобным же образом, хотя и заметно труднее, можно получить результаты для гамильтонианов, обладающих симметрией относительно поворота на угол $\varphi = \frac{2\pi}{n}$.

Наконец, следует отметить, что практически все гладкие потенциальные модели, приобретшие популярность среди хаологов, а именно потенциалы Барбаниса (2), Хенона-Хейлиса:

$$U(x, y) = \frac{x^2 + y^2}{2} + xy^2 - \frac{x^3}{3}\quad (49)$$

СЧО (3), D_5 (4) и квадрупольных осцилляций атомного ядра (37), по понятным причинам описываются довольно простыми выражениями — полиномами невысокой степени. Как правило, это позволяет решить уравнение $U(x, y) = E$ относительно, например, переменной y аналитически, и получить явный вид линии уровня $y = f(x; E)$. Это дает возможность свести Томас-Фермиевские интегралы (46), и подобным же образом

приближения более высокого порядка, к однократным интегралам, которые если и не берутся аналитически, то могут быть получены численно гораздо легче, чем исходные (рис. 12).

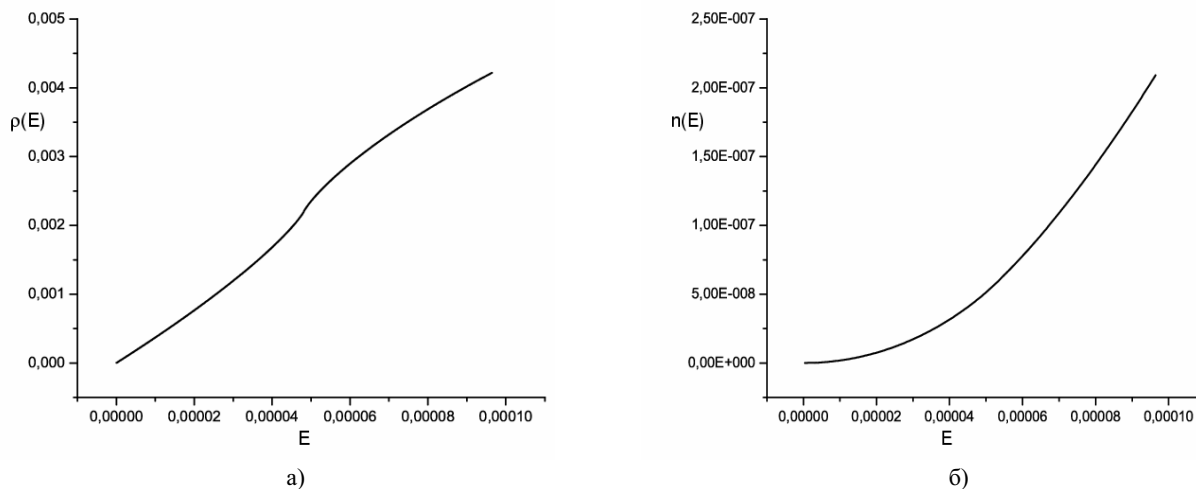


Рис. 12. Плотность $\rho(E)$ (а) и число состояний $n(E)$ (б) для $\hbar = 1$ в Томас-Фермиевском приближении для потенциала (37).

Наиболее важным применением квазиклассических выражений в области квантового хаоса является использование $n(E)$ для общепринятой формы разворачивания спектра:

$$\varepsilon_n = n(E_n). \quad (50)$$

В результате исходный спектр преобразуется к квазиэквидистантному:

$$\rho(\varepsilon) = 1 \quad (51)$$

и только для таких преобразованных спектров имеет смысл теория проявлений квантового хаоса в статистических свойствах энергетических уровней [15,16].

Кроме этого, квазиклассическое выражение для $n(E)$ представляет собой важный независимый критерий оценки точности численных результатов. Например, сравнение численно построенной $n(E)$ с квазиклассической позволяет оценить количество потерянных либо лишних уровней (рис. 13).

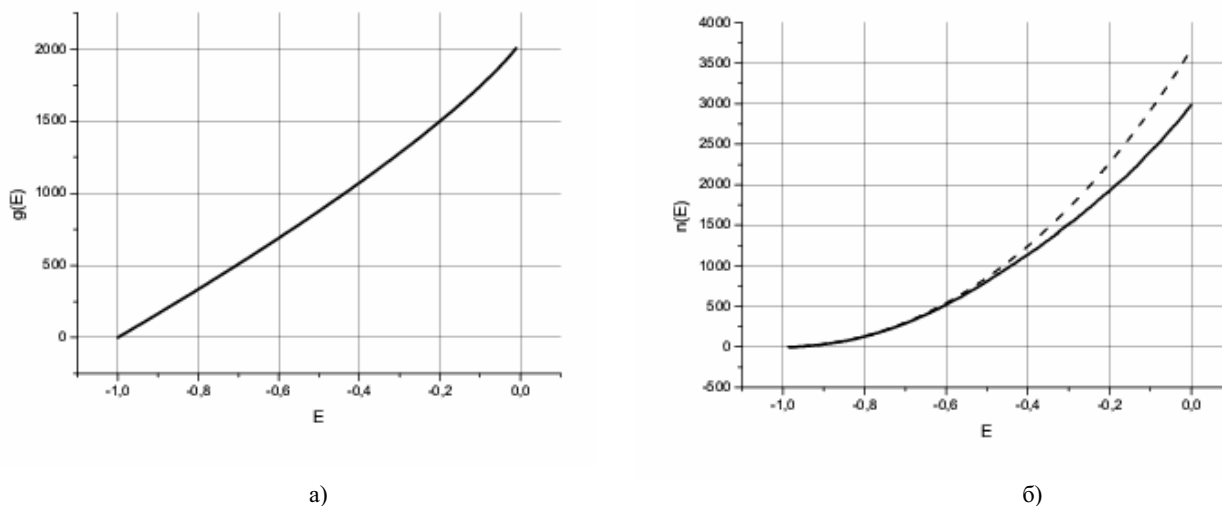


Рис. 13. Плотность $\rho(E)$ (а) и число $n(E)$ (б) (пунктиром) состояний в Томас-Фермиевском приближении в сравнении со ступенчатой $n(E)$ численно полученных уровней энергии (четных и нечетных состояний) для потенциала D_5 (4).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Гладкие потенциальные системы до сих пор остаются слабо изученной областью квантового хаоса. Во многом это объясняется сложностью численного анализа таких систем по сравнению с более простыми — биллиардами и отображениями. При этом с точки зрения эксперимента и приложений несомненна актуальность

изучения именно потенциальных систем, в особенности имеющих сложную форму потенциальной поверхности с несколькими локальными минимумами.

Данная работа имеет своей целью дальнейшее развитие численных методов в применении к задачам квантового хаоса: оптимизацию традиционного МД, дальнейшую разработку еще недостаточно известного СМ и комбинирование этих методов с привлечением аналитических результатов квазиклассического подхода.

Основным результатом работы является демонстрация преимуществ СМ перед МД и его перспективность для решения современных задач квантового хаоса. По мере развития исследований квантового хаоса в гладких потенциальных системах следует ожидать смещения внимания исследователей от традиционного изучения статистических свойств больших групп близких квантовых состояний в сторону развития малоизученной концепции квантовых проявлений классической стохастичности в отдельно взятом единичном состоянии. В подобных исследованиях, в особенности в потенциалах сложной геометрии, ключевая роль будет принадлежать СМ.

Автор выражает благодарность Ю.Л. Болотину за плодотворное обсуждение результатов работы.

Работа поддержана Министерством образования и науки Украины в рамках Программы научно-технического сотрудничества между Украиной и Республикой Словения (Договор № М/118-2005).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Елютин П.В. Проблема квантового хаоса // УФН. – 1988. – Т. 155. – С. 397-442.
2. Прайс Д. Наука о науке / Пер. с англ. под ред. В.Н. Столетова. - Москва: Прогресс. - 1966. – С. 236-238.
3. Андрианов А.Н., Бабенко К.И., Забродин А.В. и др. Вычислительные процессы и системы / Под ред. Г.И. Марчука. Москва: Наука. – 1985. – Вып. 2- С. 13-16.
4. 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.
5. Antia H.M. Numerical Methods for Scientists and Engineers. New Delhi: HBA. - 2002. – P. 175-205.
6. Mozel V., Greiner W. Investigation of the collective potential energy surface // Z. Phys. – 1968. - V. 217. - P. 256-274.
7. 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.
8. Болотин Ю.Л., Гончар В.Ю., Инопин Е.В. Хаос и катастрофы в квадрупольных колебаниях ядер // ЯФ. – 1987. - Т. 45. - С. 45-53.
9. 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.
10. 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.
11. 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.
12. Березовой В.П., Болотин Ю.Л., Черкасский В.А. Проявления квантового хаоса в квадрупольных поверхностных осцилляциях ядер // Вестник ХНУ, серія фізична “Ядра, частинки, поля”. – 2004. – № 628. - С. 47-60.
13. Podolskiy V., Narimanov E. Semiclassical Description of Chaos-Assisted Tunneling // Phys. Rev. Lett. – 2003. - V. 91. - P. 263601-263606.
14. Whelan N.D. // J. Phys.A. – 1997. – V. 30. – P. 533-546.
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.

COMBINED IMPLEMENTATION OF NUMERICAL AND ANALYTICAL METHODS FOR INVESTIGATIONS OF QUANTUM CHAOS IN SMOOTH POTENTIALS OF COMPLICATED GEOMETRY

V.A. Cherkaskiy

Akhiezer Institute for Theoretical Physics

National Scientific Center “Kharkov Institute of Physics and Technology”

Academicheskaya Str.1, 61108 Kharkov, Ukraine

The paper presents brief review of the basic types of computational problems, arising in investigations of quantum chaos signatures in certain physical models — energy spectrum determination, stationary wave functions calculation, simulation of wave packets time evolution. Author analyses advantages, disadvantages and specifics of application of certain numerical and analytical methods for solution of similar problems — matrix diagonalization and spectral methods for solution of Schrödinger equation, different spectrum unfolding methods and others. Advantages of spectral method compared to matrix diagonalization were demonstrated and explained.

KEY WORDS: quantum chaos, numerical methods, semiclassical approach