

СТАТИСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЕКТРА И ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ДВУМЕРНОГО МНОГОЯМНОГО C_{2v} СИММЕТРИЧНОГО ГАМИЛЬТОНИАНА

Н.А. Чеканов, Е.В. Шевченко

Белгородский государственный университет
308015 Белгород, ул. Победы, 85
chekanov@bsu.edu.ru

Для квантовой гамильтоновой C_{2v} -симметричной системы, поверхность потенциальной энергии которой имеет два локальных минимума, решена задача на собственные значения. Построены функция распределения расстояний между соседними уровнями, спектральная жесткость Дайсона, а также рисунки узловых линий для некоторых волновых функций. Полученные результаты сопоставлены с теоретическими предсказаниями для регулярных и хаотических систем.

Ключевые слова: хаос, уравнение Шрёдингера, спектр, волновые функции, спектральная жесткость, надальная картина.

Введение

Проявление классического хаоса в квантовой механике является предметом ряда исследований последних лет (см., например, [1, 2]). Одним из предложенных направлений поиска квантовых проявлений классического хаоса является анализ статистических свойств спектра квантового аналога исследуемой системы [1]. В связи с этим рассматриваются следующие статистические характеристики: 1) распределение $p(s)$ расстояний между соседними энергетическими уровнями и 2) спектральная жесткость $\Delta_3(L)$ Дайсона. Согласно гипотезе об универсальном законе флуктуаций энергетических спектров [1], функция распределения $p(s)$ расстояний s между соседними энергетическими уровнями системы, классическое движение которой регулярно, является пуассоновской: $p(s) = \exp(-s)$, а для систем с хаотическим движением $p(s) = As^\beta \exp(-Bs^2)$, где A , B , β – параметры. В частности, $p(s) = \pi s/2 \exp(-\pi s^2/4)$ – распределение Вигнера, являющееся хорошим приближением функции $p(s)$ для хаотических систем, статистические свойства спектра которых описываются гауссовым ортогональным ансамблем матриц со случайными элементами.

Спектральная жесткость $\Delta_3(L)$ Дайсона определяется на интервале энергий $[\alpha, \alpha + L]$ как наименьшее среднеквадратичное отклонение ступенчатой функции $N(E)$ от прямой наилучшего приближения [1]:

$$\Delta_3(\alpha; L) \equiv \frac{1}{L} \min_{A, B} \int_{\alpha}^{\alpha+L} [N(x) - (Ax + B)]^2 dx.$$

Статистика $\Delta_3(L)$ позволяет оценить степень жесткости спектра: а именно, чем меньше значение $\Delta_3(L)$ при фиксированном L , тем более жестким (скоррелированным на больших расстояниях) является спектр. Теоретически предсказаны



следующие выражения для $\Delta_3(L)$ [2]: $\Delta_3(L) = L/15$ в интегрируемых классических системах и $\Delta_3(L) \rightarrow \gamma \ln L + \delta$ для систем, квантовый спектр которых хорошо описывается теорией матриц со случайными элементами. В частности, $\Delta_3(L) \rightarrow (1/\pi^2) \ln L - 0,00695$, если свойства флуктуирующей составляющей спектра описываются гауссовым ортогональным ансамблем матриц со случайными элементами.

Исследуют также влияние характера классического движения системы на структуру волновых функций. В связи с этим рассматривают узловую структуру волновой функции – т.е. структуру линий, на которых $\psi(x, y) = 0$. Известны следующие теоретические предсказания: для интегрируемой системы, допускающей разделение переменных в ортогональной системе координат, узловые линии волновых функций в общем случае пересекаются [3]. Для систем, классическое движение которых является хаотическим, предполагается, что в полуклассическом пределе волновая функция будет равномерно распределена во всей области классически допустимого движения, узловые линии не будут иметь четко выраженной структуры, и при этом будут преобладать «избегнутые» пересечения узловых линий (т.е. узловые линии не пересекаются) [4, 5].

Указанный анализ спектра и структуры волновых функций был проведен, в основном, для бильярдных систем и гамильтоновых систем, поверхность потенциальной энергии (ППЭ) которых имеет единственный минимум (см., например, [6, 7]). Представляет интерес исследование гамильтоновых систем общего вида, в том числе систем, ППЭ которых имеет несколько минимумов.

В настоящей работе приведены результаты исследования двумерной гамильтоновой системы, ППЭ которой имеет при выбранных параметрах два локальных минимума. Для данной системы методом диагонализации вычислены собственные состояния и проведено исследование статистических свойств спектра и узловой структуры волновых функций.

Система в классическом рассмотрении

Рассматривается классическая система, описываемая функцией Гамильтона в виде

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

$$V(x, y) = \frac{a}{2}(x^2 + y^2) - \frac{a'}{2}x^2 + bx^2y^2 + c(x^2 + y^2)^2, \quad (16)$$

где (p_x, p_y) и (x, y) – канонически сопряженные импульсы и координаты соответственно, a, a', b, c – параметры; а также квантовый аналог системы (1), оператор Гамильтона H которой получается из классического выражения (1) известной заменой: $p_x \rightarrow p_x = -i\partial/\partial x$, $p_y \rightarrow p_y = -i\partial/\partial y$. Считаем, что как переменные, так и параметры являются величинами безразмерными. Система (1) имеет симметрию C_{2v} , которая соответствует группе симметрии прямоугольника. Эта группа имеет четыре неприводимых представления: A_1, A_2, B_1, B_2 .

Число особых точек потенциальной функции (16) зависит от выбора параметров. В данной работе приведено исследование системы (1) с параметрами

$$a = 1,849; a' = 8,257825; b = -0,28707; c = 0,375509, \quad (2)$$

при которых ППЭ (16) имеет два локальных минимума в точках $M_0(-\xi; 0)$, $M_1(\xi; 0)$ и одну седловую точку $S(0; 0)$. Функция $V(x, y)$ принимает в локальных минимумах значение $V_{\min} = \xi^4/c$, где $\xi = \sqrt{a' - a}/(2\sqrt{c})$.

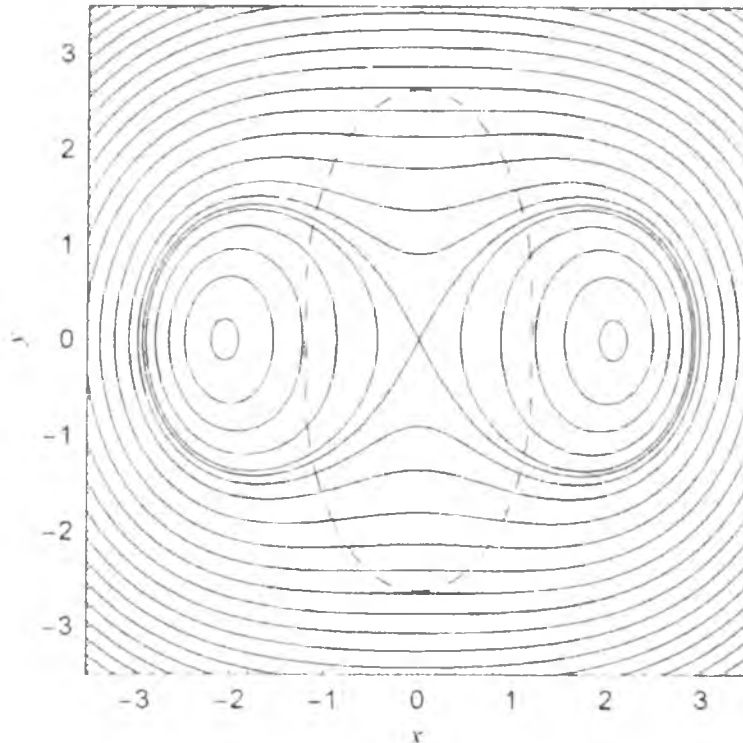


Рис. 1. Линии уровней ППЭ (16).

Пунктиром обозначена линия нулевой гауссовой кривизны

Наличие седловой точки на ППЭ (16) свидетельствует о присутствии на этой поверхности областей с отрицательной гауссовой кривизной, что указывает на возможность существования классического хаоса в системе (1). Для ППЭ (16) область с отрицательной гауссовой кривизной является ограниченной, и может иметь место переход регулярность-хаос-регулярность ($R_1 - C - R_2$) [8]. Критические энергии перехода регулярность-хаос (E_{cr1}) и хаос-регулярность (E_{cr2}) можно определить на основе критерия отрицательной гауссовой кривизны [9]. Для системы (1)

$$E_{cr1} = -5(a' - a)^2/(144c), \quad E_{cr2} = (a' - a)(ab + ac + a'c)/(4(b + 2c)^2). \quad (3)$$

В частности, при параметрах (2) $E_{cr1} \approx -3,7979$, $E_{cr2} \approx 24,2988$.

В настоящей работе приведены результаты исследования движения системы (1) в области восстановления регулярного движения R_2 ($E > E_{cr2}$). Одним из методов исследования характера классического движения системы является метод сечений Пуанкаре. Сечения Пуанкаре были построены нами для значений энергии из каждой об-



ласти движения R_1 , C , R_2 . В частности, в области R_2 – для $E = 100; 200; 300$. На рис. 2 приведены сечения Пуанкаре, построенные для значений энергии из областей R_1 и R_2 .

Заметим, что сечения Пуанкаре, полученные для области R_2 при значениях энергии $E \sim E_{cr2}$, демонстрируют сложную структуру фазового пространства, в котором хаотические и регулярные траектории сосуществуют. Восстановление регулярности движения, проявляемое на сечениях Пуанкаре в виде гладких замкнутых линий, наблюдалось нами при гораздо больших значениях энергии ($E \gg E_{cr2}$).

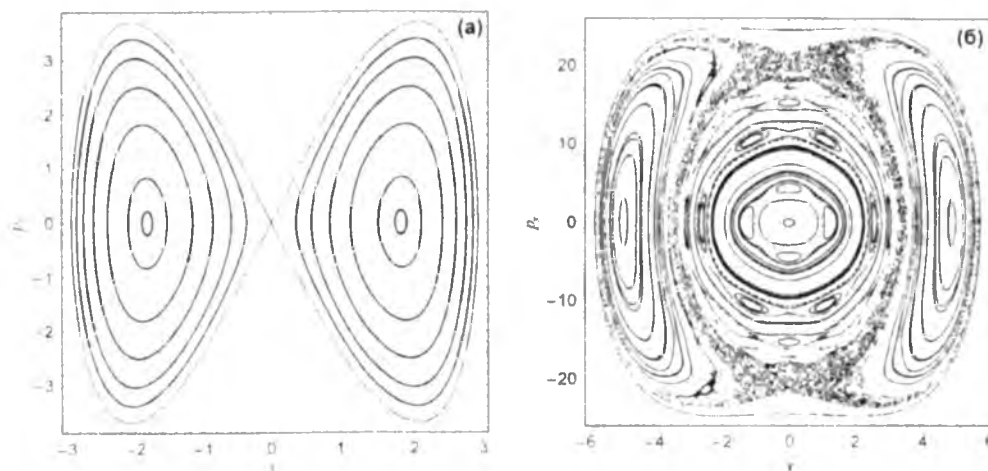


Рис. 2. Сечения Пуанкаре, построенные для системы (1) при значениях энергии: (а) $E = 0$, область движения R_1 , (б) $E = 300$, область движения R_2

Энергетический спектр и волновые функции

Рассмотрим квантовый аналог гамильтониана (1)

$$H = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{a}{2} (x^2 + y^2) - \frac{a'}{2} x^2 + bx^2 y^2 + c(x^2 + y^2)^2, \quad (4)$$

где a, a', b, c – параметры, задаваемые соотношениями (2).

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

$$H(x, y)\psi(x, y) = E\psi(x, y). \quad (5)$$

Собственные состояния гамильтониана (4) были вычислены нами при помощи процедуры диагонализации гамильтоновой матрицы $\langle n'_x, n'_y | H | n_x, n_y \rangle$. Для вычисления энергетического спектра был использован набор базисных функций невозмущенного гармонического осциллятора

$$\psi(x, y) = \sqrt{\frac{\omega}{2^{n_x+n_y} n_x! n_y! \pi}} \exp\left\{-\frac{\omega}{2}(x^2 + y^2)\right\} H_{n_x}(x\sqrt{\omega}) H_{n_y}(y\sqrt{\omega}), \quad (6)$$

где $H_n(t)$ – полиномы Чебышева-Эрмита, ω – подгоночный параметр. Базисные функции (6) были выбраны таким образом, чтобы учесть полную симметрию системы (4), а именно – получить блочную структуру гамильтоновой матрицы, где



каждый блок соответствует неприводимому представлению группы C_{2v} . Базисные функции для каждого из неприводимых представлений группы C_{2v} задаются общей формулой (6) в зависимости от значения квантовых чисел n_x и n_y , как показано в табл. 1.

Таблица 1

Классификация базисных функций (6) в соответствии с неприводимыми представлениями группы симметрии C_{2v}

Тип симметрии	n_x	n_y	n'_x	n'_y
A_1	чет	чет	чет	чет
A_2	нечет	нечет	нечет	нечет
B_1	нечет	чет	нечет	чет
B_2	чет	нечет	чет	нечет

Обозначим $n_1 = n_x$, $n_2 = n_y$. Используя условие ортогональности и рекуррентные соотношения для полиномов Чебышева-Эрмита, можно получить следующее выражение для вычисления матричных элементов:

$$\begin{aligned} \langle n'_1, n'_2 | H | n_1, n_2 \rangle = & \omega(n_1 + n_2 + 1) \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} + \\ & + \frac{a - a' - \omega^2}{2\omega} \delta_{n_2 n'_2} F_2(n_1, n'_1) + \frac{a - \omega^2}{2\omega} \delta_{n_1 n'_1} F_2(n_2, n'_2) + \\ & + \frac{b + 2c}{\omega^2} F_2(n_1, n'_1) F_2(n_2, n'_2) + \frac{c}{\omega^2} (\delta_{n_2 n'_2} F_4(n_1, n'_1) + \delta_{n_1 n'_1} F_4(n_2, n'_2)). \end{aligned} \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} F_2(m, m') = & 1/2 \left\{ \sqrt{(m+1)(m+2)} \delta_{m'(m+2)} + \right. \\ & \left. + (2m+1) \delta_{m'm} + \sqrt{m(m-1)} \delta_{m'(m-2)} \right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} F_4(m, m') = & 1/4 \left\{ \sqrt{(m+1)(m+2)(m+3)(m+4)} \delta_{m'(m+4)} + \right. \\ & + 4(m+3/2) \sqrt{(m+1)(m+2)} \delta_{m'(m+2)} + 6(n^2 + n + 1/2) \delta_{m'm} + \\ & \left. + 4(m-1/2) \sqrt{m(m-1)} \delta_{m'(m-2)} + \sqrt{m(m-1)(m-2)(m-3)} \delta_{m'(m-4)} \right\}. \end{aligned} \quad (9)$$

δ_y – символ Кронекера, ω – подгоночный параметр.

Из формул (7)–(9) можно заключить, что гамильтонова матрица $\langle n'_1, n'_2 | H | n_1, n_2 \rangle$ для каждого из типов симметрии имеет ленточную структуру с шириной ленты $2m+1$, где полуширина m определяется в зависимости от главного квантового числа $N = n_1 + n_2$ по формуле

$$m(N) = \begin{cases} \dim_H(N), & N < 4, \\ \dim_H(N) - \dim_H(N-4), & N \geq 4. \end{cases} \quad (10)$$



Можно показать, что размерность $\dim_H(N)$ гамильтоновой матрицы в зависимости от N определяется для каждого типа симметрии по формулам

$$\dim_{H_{A_1}}(N) = \frac{1}{2}([\frac{N}{2}] + 1)([\frac{N}{2}] + 2), \tag{11}$$

$$\dim_{H_{A_2}}(N) = \begin{cases} 0, & N < 2, \\ \dim_{H_{A_1}}(N - 2), & N \geq 2, \end{cases} \tag{12}$$

$$\dim_{H_{A_3}}(N) = \dim_{H_{A_1}}(N) = \begin{cases} 1, & N < 2, \\ \dim_{H_{A_1}}(N - 1), & N \geq 2, \end{cases} \tag{13}$$

где $[x]$ обозначает целую часть числа x , не превосходящую x . В частности, при

$$N = 2k, (k = 0, 1, 2, \dots), \dim_{H_{A_1}}(N) = N^2/8 + 3N/4 + 1, m_{H_{A_1}}(N) = N + 1.$$

При численном решении задачи на собственные значения (5) элементы гамильтоновой матрицы упорядочивались по значению квантового числа N , $N = 0, 1, \dots, N_{\max}$. Диагонализация гамильтоновой матрицы была проведена нами при помощи процедуры приведения симметричной ленточной матрицы к трехдиагональному виду методом конечного числа вращений Якоби [10, с. 244] и процедуры вычисления отдельных собственных значений, заключенных в конечном интервале симметричной трехдиагональной матрицы методом деления отрезка пополам и соответствующих им собственных векторов методом обратной итерации [10, с. 367].

Было получено 2211 уровней энергии типа A_1 и 2145 уровней энергии для каждого из типов A_2, B_1, B_2 . Из них около 40% уровней вычислены с погрешностью $\Delta < 0,1 \cdot s_{\min}$, где s_{\min} – минимальное расстояние между соседними энергетическими уровнями, и приняты для дальнейшего исследования. Погрешность Δ мы определяли по формуле

$$\Delta = \max_i |a_i^{(N_{\max})} - a_i^{(N_{\max} - 1)}|, \tag{14}$$

здесь $a_i^{(N_{\max})}, a_i^{(N_{\max} - 1)}$ – i -е уровни энергии, полученные при диагонализации гамильтоновых матриц, вычисленных для значений квантового числа $N = N_{\max}$ и $N = N_{\max} - 1$ соответственно. Приемлемые уровни энергии оказались в диапазоне $V_{\min} < E < 360, V_{\min} \approx -6,4$. В табл. 2 приводятся нижайшие уровни энергии, полученные для каждого из типов симметрии.

Таблица 2

Нижайшие уровни энергии системы (2)
для каждого из неприводимых представлений группы C_{2v}
(уровни приведены с 8 значащими цифрами после запятой)

№	A_1	A_2	B_1	B_2
1	-3,89893232	-1,41966695	-3,89728929	-1,42326454
2	-0,91120548	1,52889092	-0,80750584	1,34598198
3	1,11393307	3,92284156	1,19655322	3,24187776
4	1,20422359	4,36480986	2,05564829	3,91832022
5	3,61510106	6,68252955	4,03865580	5,93997294
6	3,77161265	7,67699808	5,29953269	6,29344547
7	5,61680844	9,53137377	6,73433206	8,18453989
8	6,73881813	9,71075747	6,90708453	9,55813179
9	7,14825999	11,57000345	9,13199317	9,64598388
10	8,49965235	12,31513071	9,44517964	11,21787017



Статистические свойства флуктуаций спектра

Для анализа статистических свойств спектра необходимо сначала исключить из рассмотрения его гладкую составляющую, свойства которой не являются универсальными [1, 11]. Для этого ступенчатую функцию $N(E)$ (показывающую количество энергетических уровней со значением, меньшим E) представляют в виде суммы гладкой и флуктуирующей частей:

$$N(E) = N_{av}(E) + N_{fluct}(E) \quad (15)$$

и затем вычисляют нормализованные собственные значения при помощи процедуры «развертки» спектра, задаваемой соотношением [2]

$$x_n + 1/2 = N_{av}(E_n). \quad (16)$$

Мы вычислили гладкую составляющую $N_{av}(E)$ при помощи нескольких первых членов разложения в ряд Грамма-Шарлье эмпирической функции распределения $F(x)$ нормированной случайной величины $x = (E - m_E)/\sigma$ (где m_E – математическое ожидание, σ – стандартное среднеквадратичное отклонение спектра $\{E_i\}$) [11]. При этом, для лучшего приближения ступенчатой функции $N(E)$ кривой $N_{av}(E)$, исходный спектр разбивался нами на несколько интервалов, и вычисление функции $N_{av}(E)$ проводилось для каждого из интервалов в отдельности.

Для функции $p(s)$ и жесткости $\Delta_3(L)$ были получены качественно одинаковые результаты для всех типов симметрии. На рис. 3 отображены спектральные характеристики, полученные для типа симметрии A_1 . Сплошной линией обозначены теоретические предсказания для регулярных систем, а пунктирной – для хаотических систем, свойства флуктуирующей составляющей спектра которых описываются гауссовым ортогональным ансамблем матриц со случайными элементами.

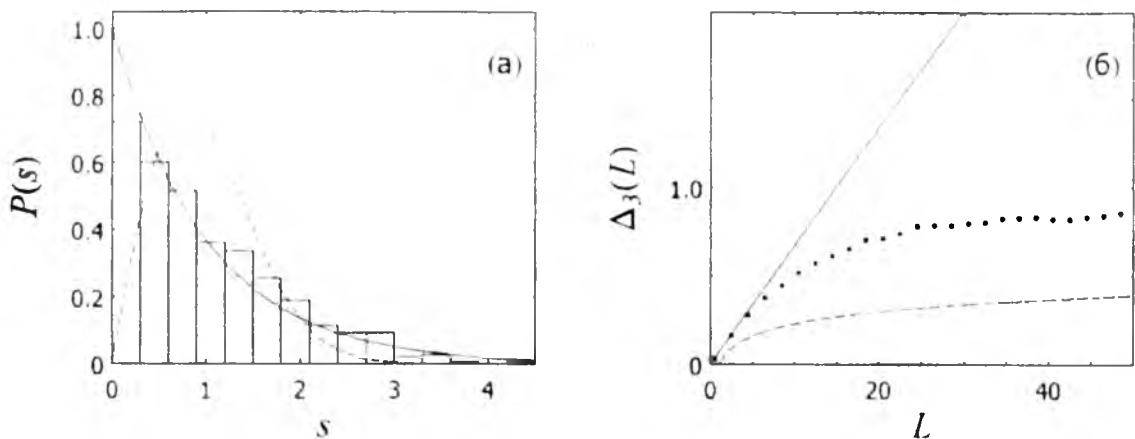


Рис. 3. Распределение расстояний между соседними энергетическими уровнями (слева) и спектральная жесткость Дайсона (справа) для уровней типа A_1 .

Количество уровней в гистограмме – 501 (уровни с 500 по 1000, $E_{500} \approx 208,9$; $E_{1000} \approx 339,9$), количество интервалов разбиения – 15. Спектральная жесткость – среднее по ансамблю уровней с 470 по 970, с 500 по 1000 и с 530 по 1030



Проведенный анализ в квантово-механическом рассмотрении показал хорошее согласие статистических свойств спектра с теоретическими предсказаниями для регулярных систем. А именно: распределение $p(s)$ хорошо описывается распределением Пуассона $p(s) = \exp(-s)$, а статистика $\Delta_3(L) \approx L/15$ до некоторого значения L_{\max} ($0 \leq L \leq L_{\max}$), после чего происходит ее насыщение [12]. Для численного расчета статистики $\Delta_3(L)$ мы использовали процедуру, описанную в [1].

Узловая структура волновых функций

Точность расчета собственных векторов определялась нами так же, как и в случае собственных значений, по насыщению. Для нашего исследования мы принимали собственные векторы, вычисленные с погрешностью $\Delta < 1 \cdot 10^{-6}$. Для конкретного собственного вектора \vec{C}_i , отвечающего собственному значению E_i , можно определить погрешность Δ_i :

$$\Delta_i = \max_j \left| C_{ij}^{(N_{\max})} - C_{ij}^{(N_{\max}-1)} \right|. \quad (17)$$

Тогда $\Delta = \max_i \Delta_i$. На рис. 4 приведены полученные нами рисунки узловых линий для волновых функций системы (4) для типов симметрии A_1 и A_2 . Подобные рисунки получены нами для волновых функций типов B_1 и B_2 . Как видно из рис. 4, узловые линии волновых функций показывают регулярную структуру, близкую к структуре шахматной доски, что согласуется с теоретическими предсказаниями для регулярных систем.

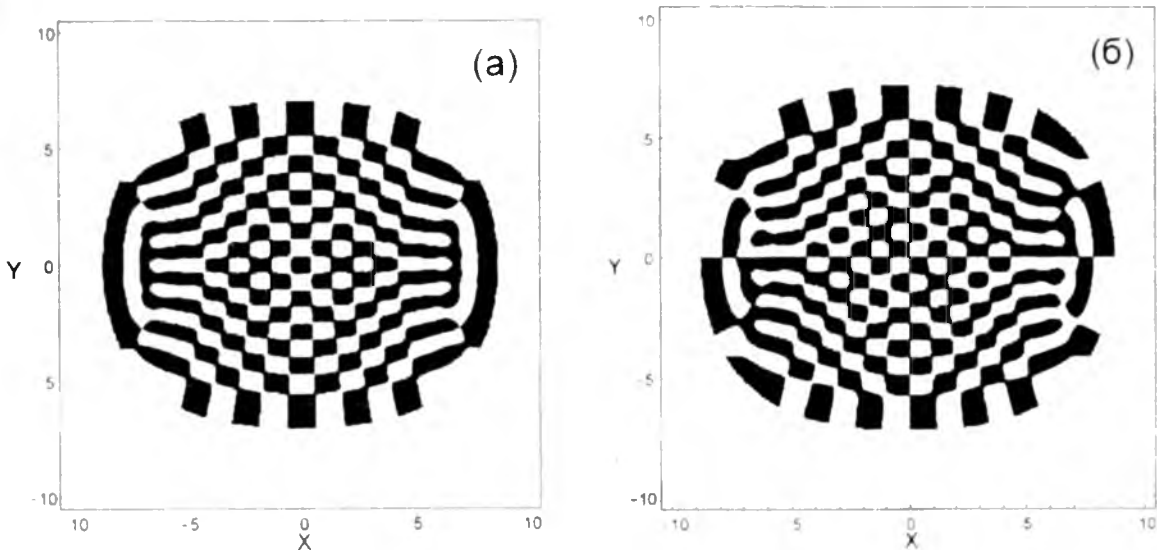


Рис. 4. Узловая структура волновых функций системы (4) (черным и белым цветом отмечены области знакопостоянства волновой функции):
(а) тип симметрии A_1 . $E = 64,8496$, (б) тип симметрии A_2 . $E = 71,5117$

Заключение

Проведенное исследование является частью нашего исследования двумерных гамильтоновых систем, ППЭ которых имеет сложную топологию. Представляет интерес исследовать статистические свойства спектра и поведение волновых функций в областях R_1 и C , а также в области R_2 при увеличении размерности гамильтоновой матрицы.

Работа поддержана грантом БелГУ.



Литература

1. Bohigas O., Giannoni M.J. Chaotic motion and random-matrix theory // Lecture Notes in Physics. – New-York Springer-Verlag, 1984. – V. 209. – P. 1871-1969.
2. Berry M.V. Classical Chaos and Quantum Eigenvalues. Order and Chaos in nonlinear physical systems (ed. S. Lundquist, N. March and M. Tosti). – New York and London: Plenum Press, 1988. – P. 340-348.
3. Pechukas P. Semiclassical Approximation of Multidimensional Bound States. // J. Chem. Phys. – 1972. – V.57. – P.5577-5594.
4. Berry M.V. Semiclassical Mechanics of regular and irregular motion. // Les Houches Lecture Series Session XXXVI, eds. G. Iooss, R. H. G. Helleman and R. Stora. – North Holland, Amsterdam, 1983. – P.171-271.
5. Berry M.V. Regular and irregular semiclassical wave functions // J. Phys. A: Math. Gen. – 1977/ – V.10. – P.2083-2091.
6. McDonald S.W., Kaufman A.N. Spectrum and Eigenfunctions for a Hamiltonian with Stochastic Trajectories // Phys. Rev. Lett., 1979. – V. 42. – P. 1189-1191.
7. Matsuyama A. Numerical study of the quantum mechanical Toda lattice // Phys. Lett., 1991. – V. A161. – P. 124-129.
8. Bolotin Yu.L., Gonchar V.Yu., Tarasov V.N., Chekanov N.A. The transition regularity-chaos-regularity and statistical properties of wave function // Phys. Lett., 1990. – V. A144, №. 8, 9. – P. 459-461.
9. Krivoshey I.V. Dynamic chaos and instability in barrier processes of chemical dynamics. Sov. Sci. Rev. B. Chem., 1988. – V. 11. – P. 123.
10. Уилкинсон Дж., Райнш К. Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ // Линейная алгебра. – М.: Машиностроение, 1976. – 389 с.
11. Brody T.A., Flores J., French J.B., Mello P.A., Pandey A., and Wong S.S.M. Random-matrix physics: spectrum and strength fluctuations // Rev. Mod. Phys., 1981. – V. 53. – P. 385-479.
12. Berry M.V. Semiclassical theory of spectral rigidity // Proc. R. Soc. – 1985. – V. A400. – P. 229-251.

STATISTICAL PROPERTIES OF THE SPECTRUM AND WAVE FUCTIONS FOR THE TWO-DIMENSIONAL DOUBLE-WELL C_{2v} SYMMETRIC HAMILTONIAN

N.A. Chekanov and E.V. Shevchenko

Belgorod State University,
308007, Belgorod, Studencheskaj Str., 14, Russia

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

Key words: deterministic chaos, Shroedinger's equation, spectrum, wave functions, distribution function of spacing between the nearest-neighbor energy levels, nodal picture of the wave functions.