

УДК 519.711.3

Исследование нелинейной гамильтоновой системы методом нормальной формы Биркгофа-Густавсона

В. Е. Богачев¹⁾, И. К. Кириченко²⁾, Н. Н. Чеканова²⁾, Н. А. Чеканов³⁾¹⁾ Белгородский университет кооперации, экономики и права, Россия²⁾ Украинская инженерно-педагогическая академия, Украина³⁾ Белгородский юридический институт МВД России, Россия

В статье приведены результаты исследования автономной двумерной гамильтоновой системы в классическом и квантовом подходах. Показано, что при классическом рассмотрении, в такой системе даже при наличии областей с отрицательной гауссовой кривизной отсутствует динамический хаос. При определенных значениях параметров в классической функции Гамильтона найден интеграл движения. Эти результаты подтверждаются проведенными численными расчетами сечений Пуанкаре. Получена классическая нормальная форма Биркгофа-Густавсона, а также ее квантовый аналог согласно правилу квантования Вейля. На основе этого квантового аналога получены приближенные формулы для вычисления энергетического спектра нижайших состояний для локального минимума, расположенного в начале координат.

Ключевые слова: гамильтонова система, нормализация Биркгофа-Густавсона, квантование, компьютерное моделирование.

У статті наведені результати дослідження автономної двовимірної гамильтонової системи в класичному і квантовому підходах. Показано що, в цій системі, навіть за наявності областей з негативною гауссовою кривизною, відсутній динамічний хаос при класичному розгляді. При певних значеннях параметрів в класичній функції Гамільтона знайдений інтеграл руху. Ці результати підтверджуються проведеними чисельними розрахунками перетинів Пуанкаре. Отримано класична нормальна форма Біркгофа-Густавсона, а також її квантовий аналог згідно з правилом квантування Вейля. На основі цього квантового аналога отримані наближені формули для обчислення енергетичного спектра найнижчих станів для локального мінімуму, розташованого на початку координат.

Ключові слова: гамильтонова система, нормалізація Біркгофа-Густавсона, квантування, комп'ютерне моделювання.

The paper presents the results obtained with both classical and quantum approaches to autonomous 2D Hamiltonian system. Even if such system has negative Gaussian domains, the classical approach shows no dynamical chaos. For certain values of classical Hamilton function parameters, the motion integral is found. Direct numerical calculations for Poincare sections confirm the results. The classical normal Birkhoff-Gustavson form and its quantum analogue according to Weyl rule are derived. On the base of this quantum analogue, the approximate formulas are obtained for evaluation of energy spectrum of the lowest states for the local minimum situated at the origin.

Key words: Hamilton's system, Birkhoff-Gustavson normalization, quantization, computer modeling.

1. Общая постановка задачи. Анализ публикаций по теме исследования

В настоящее время усилия ученых направлены на исследования различных явлений, которые описываются нелинейными дифференциальными уравнениями или их системами. Это связано с тем, что их описание при помощи нелинейных дифференциальных уравнений является более адекватным по сравнению с их анализом в теории обыкновенных линейных дифференциальных

уравнений [1].

В настоящее время найти решение нелинейных дифференциальных уравнений и их систем в явном виде через известные элементарные или специальные функции есть задача нерешенная. Кроме того, подавляющее число нелинейных дифференциальных уравнений, несмотря на выполнение условий существования и единственности решений, допускают так называемый детерминированный или динамический хаос, открытый А. Пуанкаре еще в позапрошлом столетии [2].

Наиболее часто используемыми для описания реальных физических систем является гамильтонов формализм. Кстати говоря, что интересно, любую систему обыкновенных дифференциальных уравнений можно записать в гамильтоновом виде [3]. Методов предсказания динамического хаоса по виду функции Гамильтона к настоящему времени не существует. Тем не менее, имеются различные критерии, которые позволяют предсказать существование динамического хаоса [4]. Одним из таких критериев является критерий отрицательной гауссовой кривизны [5, 6]. Следует отметить, что этот критерий не является ни необходимым, ни достаточным, но во многих случаях существование хаоса по виду функций Гамильтона он хорошо предсказывает [7].

Еще более интригующим вопросом является вопрос о квантовом проявлении динамического хаоса в системах, которые при классическом описании допускают хаотический режим движения [8].

2. Цель статьи

В настоящей работе сообщаются результаты, которые получены для одной, предложенной нами, консервативной двумерной гамильтоновой системы с тремя произвольными параметрами. Для этой системы при определенных условиях на параметры существует дополнительный интеграл движения, кроме полной энергии, то есть система является интегрируемой. Также получена нормальная форма Биркгофа-Густавсона, которая позволяет приближенно исследовать решения исходной неинтегрируемой системы. Как известно [9], в этих случаях использование нормальной формы Биркгофа-Густавсона позволяет достаточно удовлетворительно аналитически описывать сечения Пуанкаре.

На основе классической нормальной формы Биркгофа-Густавсона в соответствии с правилом Вейля получен ее квантовый аналог. Найдены приближенные формулы для нижайших уровней энергии в центральном минимуме.

3. Основная часть

3.1. Классическое рассмотрение.

В работе рассмотрена двумерная система с функцией Гамильтона

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + V(q_1, q_2), \quad (1a)$$

$$V(q_1, q_2) = \frac{1}{2}(q_1^2 + q_2^2) + b\left(q_1^2 q_2 + \frac{1}{3} q_2^3\right) + c q_1^2 q_2^2 + d(q_1^2 + q_2^2)^2, \quad (1b)$$

где $b, c, \dots, d \dots$ – параметры.

Поверхность потенциальной энергии $V(q_1, q_2)$ (ППЭ) имеет сложный рельеф, четыре минимума, четыре Седловых точки и один максимум при произвольных значениях параметров (см. Рис. 1). При произвольных значениях параметров реализуется хаотический режим движения.

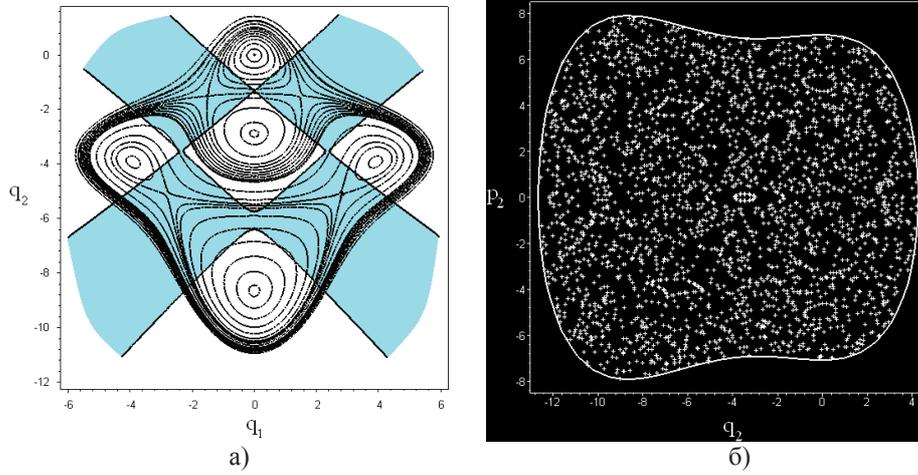


Рис. 1. а) Изолинии ППЭ и области с отрицательной ГК (затемненная область) при параметрах: $d = 1/100$, $b = 4\sqrt{3}/15$, $c = 17/375$; б) сечения Пуанкаре

При условии $c = 4d$ нами был найден второй, кроме полной энергии, интеграл движения

$$I = p_1 p_2 + q_1 q_2 + b \left(q_1 q_2^2 + \frac{1}{3} q_1^3 \right) + 4d q_1 q_2 (q_1^2 + q_2^2). \quad (2)$$

В случае интегрируемости ($c = 4d$) ППЭ имеет, тем не менее, области с отрицательной гауссовой кривизной (см. Рис. 2).

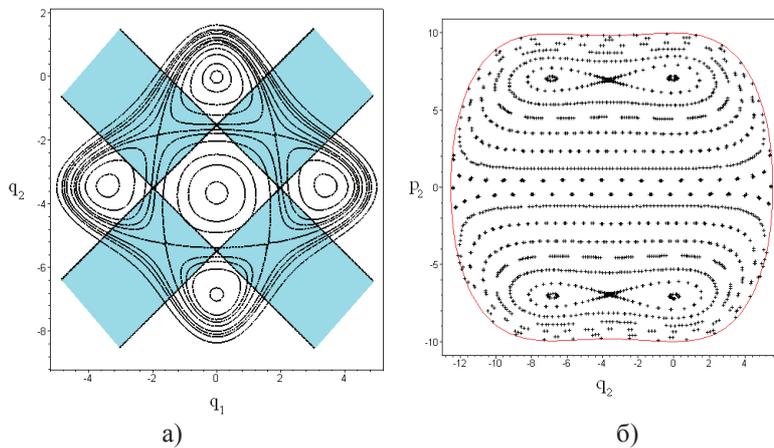


Рис. 2. а) Изолинии ППЭ и области с отрицательной ГК (затемненная область) при параметрах: $b = 0.420$, $d = 0.01$; б) сечения Пуанкаре

Проведенный анализ показывает, что исследуемая нами система отличается от изученных в литературе систем тем, что: 1) несмотря на наличие отрицательной гауссовой кривизны на ППЭ, она при условии $c = 4d$ является интегрируемой, 2) в широком диапазоне параметров стационарные точки квадратичной части ППЭ являются вырожденными, то есть ее одно или оба собственные значения равны нулю (см. Рис. 3, точки A, C и B).

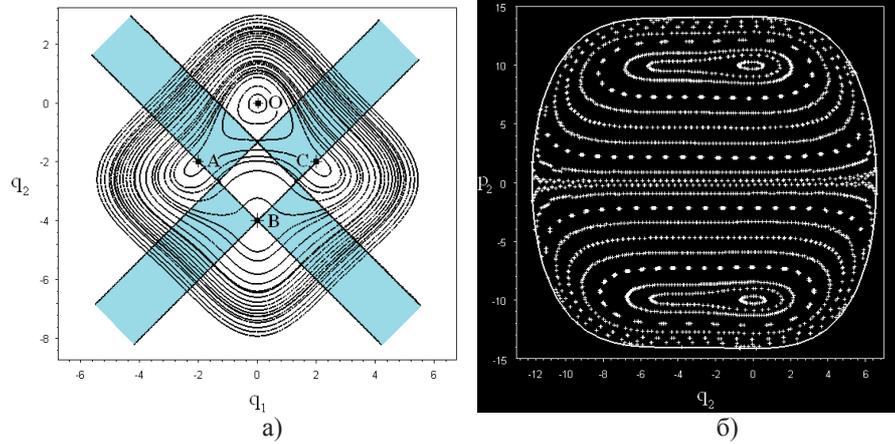


Рис. 3. а) Изолинии ППЭ и области с отрицательной ГК (затемненная область) при параметрах: $b = 1/2$, $d = 1/64$; ($c = 4d$) б) сечения Пуанкаре

В работе получена нормальная форма Биркгофа-Густавсона для гамильтоновой функции (1) в результате канонических преобразований $(p, q \rightarrow \xi, \eta)$, а затем еще одних $(\xi, \eta \rightarrow Q, P)$ с валентностью равной мнимой единице [10]:

$$\begin{aligned} \xi_1 &= 1/2i(-Q_1 + Q_2 + P_1 - P_2), & \xi_2 &= 1/2(Q_1 + Q_2 + P_1 + P_2), \\ \eta_1 &= 1/2(Q_1 - Q_2 + P_1 - P_2), & \eta_2 &= 1/2i(Q_1 + Q_2 - P_1 - P_2). \end{aligned} \quad (3)$$

С помощью программы [11] получена нормальная форма Биркгофа-Густавсона, которую представим в следующем виде:

$$\begin{aligned} -iG_6 &= \Psi_0 + C_{41}\Psi_0^2 + 4C_{42}\Psi_1^2 + 4C_{43}\Psi_2^2 + C_{61}\Psi_0^3 - 8C_{62}\Psi_3^3 - 2C_{63}\Psi_0^2\Psi_3 + \\ &+ 4C_{64}\Psi_1^2\Psi_0 - 8C_{65}\Psi_1^2\Psi_3 + 4C_{66}\Psi_2^2\Psi_0, \end{aligned} \quad (4)$$

где

$$C_{41} = 3/2d - \frac{5}{12}b^2, \quad C_{42} = -\frac{5}{12}b^2 + 3/8c, \quad C_{43} = -\frac{d}{2} + \frac{c}{8},$$

$$C_{61} = -\frac{235}{432}b^4 + \frac{173}{36}b^2d + \frac{13}{36}b^2c - \frac{17}{4}d^2, \quad C_{62} = -2/9b^2d + 1/18b^2c,$$

$$C_{63} = -\frac{11}{9}b^2d + \frac{11}{36}b^2c, \quad C_{64} = -\frac{17}{64}c^2 + \frac{277}{36}b^2d + \frac{199}{72}b^2c - \frac{235}{144}b^4 - \frac{17}{8}cd, \\ C_{65} = \frac{11}{9}b^2d - \frac{11}{36}b^2c, \quad C_{66} = 9/4d^2 - 1/2cd - \frac{1}{64}c^2 - 1/36b^2d + \frac{1}{144}b^2c. \quad (5)$$

В выражении (4) введены следующие функции:

$$\Psi_0 = Q_1P_1 + Q_2P_2, \quad \Psi_1 = \frac{i}{2}(Q_1P_2 - Q_2P_1), \\ \Psi_2 = \frac{1}{2}(Q_1P_1 - Q_2P_2), \quad \Psi_3 = \frac{1}{2}(Q_1P_2 + Q_2P_1),$$

для которых выражения для скобок Пуассона следующие

$$\{\Psi_0, \Psi_\lambda\} = 0, \quad \lambda = 1, 2, 3. \quad (6)$$

Из результатов для скобок Пуассона (6) непосредственно следует, что нормальная форма G_6 описывает интегрируемую систему, то есть G_6 является интегрируемым приближением для, в общем, неинтегрируемой исходной системы, причем выполняется тождество

$$\Psi_1^2 + \Psi_2^2 + \Psi_3^2 = \frac{1}{4}\Psi_0^2 \quad (7)$$

Имеют место также соотношения

$$\{\Psi_1, \Psi_2\} = i\Psi_3, \quad \{\Psi_2, \Psi_3\} = i\Psi_1, \quad \{\Psi_3, \Psi_1\} = i\Psi_2, \quad (8)$$

которые коротко можно записать в виде

$$\{\Psi_\lambda, \Psi_\mu\} = i\varepsilon_{\lambda\mu\nu}, \quad \lambda, \mu, \nu = 1, 2, 3, \quad (9)$$

где $\varepsilon_{\lambda\mu\nu}$ – полностью антисимметричный тензор третьего ранга (символ Леви-Чивита).

3.2. Квантовое рассмотрение

Для получения квантового аналога нормальную форму (4) представим в виде

$$G_6 = G^{(2)} + G^{(4)} + G^{(6)}, \\ G^{(2)} = Q_1P_1 + Q_2P_2, \\ G^{(4)} = C_{41}(Q_1^2P_1^2 + Q_2^2P_2^2 + 2Q_1P_1Q_2P_2) + C_{42}(-Q_1^2P_2^2 - Q_2^2P_1^2 + 2Q_1P_2Q_2P_1) + \\ + C_{43}(Q_1^2P_1^2 + Q_2^2P_2^2 - 2Q_1P_1Q_2P_2), \\ G^{(6)} = C_{61}(Q_1^3P_1^3 + Q_2^3P_2^3 + 3Q_1^2P_1^2Q_2P_2 + 3Q_1P_1Q_2^2P_2^2) + \\ + C_{62}(-Q_2^3P_1^3 - Q_1^3P_2^3 - 3Q_1^2P_2^2P_1Q_2 - 3Q_1P_2Q_2^2P_1^2) +$$

$$\begin{aligned}
 &+C_{63}\left(-Q_1^3 P_1^2 P_2 - Q_1^2 P_1^3 Q_2 - Q_2^2 P_2^3 Q_1 - Q_2^3 P_2^2 P_1 - 2Q_1^2 P_2^2 P_1 Q_2 - 2Q_1 P_2 Q_2^2 P_1^2\right) + \\
 &+C_{64}\left(-Q_1^3 P_1^2 P_2 - Q_1^2 P_2^3 Q_2 - Q_2^2 P_1^3 Q_1 - Q_2^3 P_1^2 P_2 + 2Q_1^2 P_2 Q_2 P_1^2 + 2Q_1 P_2^2 Q_2^2 P_1\right) + \\
 &\quad +C_{65}\left(Q_1^3 P_2^3 + Q_2^3 P_1^3 - Q_1^2 P_2^2 Q_2 P_1 - Q_1 P_2 Q_2^2 P_1^2\right) + \\
 &\quad +C_{66}\left(Q_1^3 P_1^3 + Q_2^3 P_2^3 - Q_1^2 P_1^2 Q_2 P_2 - Q_1 P_1 Q_2^2 P_2^2\right). \quad (10)
 \end{aligned}$$

Как известно, переход от классического описания к квантовому является неоднозначным. Имеются различные правила соответствия (см. например [12]). В настоящей работе получение квантового аналога классической функции Гамильтона (4) проводим в соответствии с правилом Вейля:

$$W\left\{Q_\nu^m \cdot P_\nu^n = P_\nu^n \cdot Q_\nu^m\right\} = \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} \hat{P}_\nu^k \cdot Q_\nu^m \cdot P_\nu^{n-k}, \quad \nu=1,2. \quad (11)$$

Далее, используя соответствие между классическими канонически сопряженными переменными и их квантовыми операторами

$$Q_\nu \rightarrow \hat{Q}_\nu^+, \quad P_\nu \rightarrow \hat{Q}_\nu \quad (12a)$$

и правилом коммутации

$$\hat{Q}_\mu \hat{Q}_\nu^+ - \hat{Q}_\nu^+ \hat{Q}_\mu = \delta_{\mu\nu}, \quad \mu, \nu=1,2, \quad (12b)$$

где $\delta_{\mu\nu}$ – символ Кронекера, по правилу Вейля (11) находим квантовый аналог нормальной формы Биркгофа-Густавсона в степенном приближении $S_{\max} = 6$ по произведению операторов Q_ν^+ и Q_μ степени $S_{\max} = 6$, который представим в виде следующей суммы

$$\begin{aligned}
 \hat{\Gamma}_6 &= \hat{\Gamma}_{diag} + \hat{\Gamma}_{nondiag}, \quad (13) \\
 \hat{\Gamma}_{diag} &= \hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 1 + C_{41} \left[\left(\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 1 \right)^2 + 1/2 \right] + \\
 &+ C_{42} \left(\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 2\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 \cdot \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 1/2 \right) + C_{43} \left[\left(\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 - \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 \right)^2 + 1/2 \right] + \\
 &+ C_{61} \left[\left(\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 \right)^3 + 3 \left(\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 \right)^2 + 5 \left(\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 \right) + 3 \right] - \\
 &+ C_{64} \left[\left(\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 1 \right) \left(\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 2\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 \cdot \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 \right) + \hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 1 \right] + \\
 &+ C_{66} \left[\left(\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 1 \right) \left(\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 - \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 \right)^2 + \hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 1 \right] \quad (14a) \\
 \hat{\Gamma}_{nondiag} &= -C_{42} \left(\hat{Q}_1^{+2} \hat{Q}_2^2 + \hat{Q}_2^{+2} \hat{Q}_1^2 \right) - C_{62} \left[6\hat{Q}_1^+ \left(\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 \right) \cdot \hat{Q}_2^+ \left(\hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 \right) + \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & +3\hat{Q}_1^+ \cdot \hat{Q}_2^+ (\hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2) + 3\hat{Q}_2^+ \cdot \hat{Q}_1^+ (\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1) + \hat{Q}_1^{+3} \hat{Q}_2^3 + \hat{Q}_2^{+3} \hat{Q}_1^3 \Big] + \\
 & -C_{63} \Big[\hat{Q}_1^+ (\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + 1)^2 \cdot \hat{Q}_2 + \hat{Q}_2^+ (\hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 1)^2 \cdot \hat{Q}_1 + 1/2 \cdot (\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_2 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_1) + \\
 & + \hat{Q}_1^+ \hat{Q}_2^+ (\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 1)^2 + 2\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_2^+ (\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 \cdot \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2) \Big] - C_{64} \Big[\hat{Q}_1^{+2} (\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + 3/2) \hat{Q}_2^2 + \\
 & + \hat{Q}_2^{+2} (\hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 3/2) \hat{Q}_1^2 + \hat{Q}_1^{+2} (\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1) \hat{Q}_2^{+2} + \hat{Q}_2^{+2} (\hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2) \hat{Q}_1^{+2} + \hat{Q}_1^{+2} \hat{Q}_2^{+2} \Big] + \\
 & + C_{65} \Big[\hat{Q}_1^{+3} \hat{Q}_2^3 + \hat{Q}_2^{+3} \hat{Q}_1^3 - 2\hat{Q}_1^+ (\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1) \cdot \hat{Q}_2^+ (\hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2) - \hat{Q}_1^+ \hat{Q}_2^+ (\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2) \Big]
 \end{aligned} \tag{146}$$

В приближении $S_{\max} = 4$ приближенный квантовый аналог исходной функции Гамильтона (1) принимает вид

$$\begin{aligned}
 \hat{G}_4 = & \hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 1 + C_{41} \Big[(\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 1)^2 + 1/2 \Big] +, \\
 & + C_{42} (\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 2\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 \cdot \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 1/2) + C_{43} \Big[(\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 - \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2)^2 + 1/2 \Big] - \\
 & - C_{42} (\hat{Q}_1^{+2} \hat{Q}_2^2 + \hat{Q}_2^{+2} \hat{Q}_1^2),
 \end{aligned} \tag{15}$$

который в интегрируемом случае ($c = 4d$) классических уравнений движения также вследствие резонанса 1:1 содержит недиагональный член (последнее слагаемое в выражении (15)).

В результате проведенного выше квантования получаем уравнение Шредингера

$$\hat{G}_6 |E\rangle = E |E\rangle, \tag{16}$$

которое в нашем приближенном подходе соответствует исходной классической гамильтоновой системе (1). Здесь в обозначениях Дирака $|E\rangle$ – вектор состояния квантовой системы с энергией равной E . Для его решения можно использовать собственные функции и значения изотропного двумерного осциллятора [10] с гамильтонианом равным

$$\hat{G}_2 = \hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 1. \tag{17}$$

Легко убедиться, что каждое собственное состояние изотропного двумерного осциллятора (17), кроме основного состояния, $(N + 1)$ -кратно вырождено.

Введя основное (вакуумное) состояние

$$\hat{Q}_1 |0,0\rangle = \hat{Q}_2 |0,0\rangle = 0 \tag{18}$$

получим следующий ортонормированный базис

$$|N,L\rangle = \left[\left(\frac{N+L}{2} \right)! \cdot \left(\frac{N-L}{2} \right)! \right]^{-\frac{1}{2}} \hat{Q}_2^{+\left(\frac{N-L}{2}\right)} \hat{Q}_1^{+\left(\frac{N+L}{2}\right)} |0,0\rangle \tag{19}$$

где N – главное квантовое число, $N = 0, 1, 2, 3, \dots$, а L – орбитальное квантовое число, которое при заданном значении N принимает следующие значения: $L = \pm N, \pm(N-2), \pm(N-4), \dots, 1$ (или 0). Используя определение основного состояния (18) и правило коммутации (12) получим следующие соотношения:

$$\begin{aligned}\hat{Q}_1^+ |N, L\rangle &= \sqrt{\frac{N+L+2}{2}} |N+1, L+1\rangle, \quad \hat{Q}_2^+ |N, L\rangle = \sqrt{\frac{N-L+2}{2}} |N+1, L-1\rangle, \\ \hat{Q}_1 |N, L\rangle &= \sqrt{\frac{N+L}{2}} |N-1, L-1\rangle, \quad \hat{Q}_2 |N, L\rangle = \sqrt{\frac{N-L}{2}} |N-1, L+1\rangle.\end{aligned}\quad (20)$$

Из соотношений (20) непосредственно следуют выражения:

$$\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 |N, L\rangle = \left(\frac{N+L}{2}\right) |N, L\rangle, \quad \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 |N, L\rangle = \left(\frac{N-L}{2}\right) |N, L\rangle, \quad (21)$$

то есть векторы $|N, L\rangle$ являются собственными для операторов $(\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1)^k$ и $(\hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2)^k$, $k = 1, 2, 3, \dots$. Абстрактный вектор состояния $|N, L\rangle$ в представлении полярных координат $u(r, \varphi) = \langle r, \varphi | N, L \rangle$ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$(\hat{Q}_1^+ \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2^+ \hat{Q}_2 + 1)u(r, \varphi) = \lambda \cdot u(r, \varphi), \quad (22)$$

где

$$\hat{Q}_{1,2}^+ = \mp \frac{i}{2} \exp(\mp i\varphi) \left(\frac{\partial}{\partial r} \mp \frac{\partial}{\partial \varphi} - r \right), \quad \hat{Q}_{1,2} = \mp \frac{i}{2} \exp(\pm i\varphi) \left(\frac{\partial}{\partial r} \pm \frac{\partial}{\partial \varphi} + r \right), \quad (23)$$

а λ – собственные значения.

В предположении, что собственная функция $u(r, \varphi)$ представима в виде

$$u(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-iL\varphi) \cdot R(r) \quad (24)$$

для радиальной функции $R(r)$ получаем следующее обыкновенное дифференциальное уравнение

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} + \left(2\lambda - r^2 - \frac{L^2}{r^2} \right) R = 0,$$

которое при замене $R = r^{|L|} \exp(r^2/2) y(r)$ приводит к уравнению

$$\frac{d^2 y}{dr^2} + \left(\frac{2|L|}{r} - 2r + \frac{1}{r} \right) \frac{dy}{dr} - (2|L| - 2\lambda + 2) y = 0,$$

а после замены $x = r^2$ приходим к уравнению Куммера [13]

$$x \frac{d^2 y}{dx^2} + (|L| + 1 - x) \frac{dy}{dx} - \frac{1}{2} (|L| - \lambda + 1) y = 0. \quad (25)$$

Решением уравнения Куммера является следующий гипергеометрический ряд

$$y(x) = M(a, b, x) = 1 + \frac{a x}{b 1!} + \frac{a(a+1) x^2}{b(b+1) 2!} + \frac{a(a+1)(a+2) x^3}{b(b+1)(b+2) 3!} + \dots, \quad (26)$$

где

$$2a = |L| + 1 - \lambda, \quad b = |L| + 1.$$

Исходя из физических соображений, согласно которым функция $y(x)$ должна быть конечной, полагаем, что $a = -n$, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Тогда гипергеометрический ряд обрывается, превращаясь в полином, а числовая величина λ должна принимать только дискретный ряд значений $\lambda = 2n + |L| + 1$ или $\lambda = N + 1$, где $N = 2n + |L|$, $N = 0, 1, 2, 3, \dots$

После известных стандартных вычислений можно получить следующий ортонормированный базисный набор функций $u(r, \varphi)$ для квантового изотропного двумерного осциллятора

$$u_{NL}(r, \varphi) = \frac{i^N \exp(-iL\varphi)}{L! \sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{[(N+L)/2]!}{[(N-L)/2]!}} r^L \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right) M(a, b, r^2), \quad (27a)$$

$$a = -\left(\frac{N-L}{2}\right), \quad b = |L| + 1, \quad (27б)$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\infty u_{N'L'}(r, \varphi) r^2 dr d\varphi = \delta_{NN'} \delta_{LL'}. \quad (27в)$$

Вычислив матричные элементы квантового аналога $\langle N', L' | N, L \rangle$ классической нормальной формы, в общем, в произвольном приближении по степеням переменных S_{\max} , можно, например, методом диагонализации найти решение уравнения Шредингера (16), то есть найти приближенные волновые функции и соответствующий приближенный энергетический спектр с определенным учетом нелинейных членов в исходной классической функции Гамильтона и для конкретной «потенциальной ямы» (локального минимума на ПШЭ).

Однако в предлагаемом подходе эти результаты приближенно равны только для энергий, не превышающих энергию потенциальной энергии в соседней к данному локальному минимуму, а также они никак не учитывают эффекты квантового туннелирования между многими локальными минимумами, которые имеются при произвольных значениях параметров в исследуемой классической системе, описываемой функцией Гамильтона (1). Найти явное аналитическое решение, как в классическом случае для системы с функцией Гамильтона (1), так и при ее точном представлении оператором Шредингера

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial q_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial q_2^2} \right) + \frac{1}{2} (q_1^2 + q_2^2) + b \left(q_1^2 q_2 + \frac{1}{3} q_2^3 \right) + c q_1^2 q_2^2 + d (q_1^2 + q_2^2)^2 \quad (28)$$

не представляется возможным. Также прямые численные расчеты даже с применением современных достаточно мощных компьютеров сталкиваются с трудностью решения задач на собственные значения, например, тщательно разработанными программными пакетами на основе метода диагонализации, какой является и задача интегрирования уравнения Шредингера для двух и более переменных.

Одна из трудностей связана с тем, что волновая функция между двумя локальными минимумами принимает значения очень близкие к нулю, поэтому из-за ограниченных возможностей современных электронных вычислительных устройств неизбежно наступает потеря значащих цифр, а в итоге на не возможность решения задачи.

Как нам кажется, одним из перспективных направлений в решении уравнения Шредингера является метод самосогласованного базиса [14], который есть модификация известного метода Канторовича [15] на случай задачи на собственные значения на бесконечном интервале. Методом самосогласованного базиса достаточно успешно найдено решение уравнения Шредингера, ППЭ которого имеет много минимумов [16].

Тем не менее, метод нормальных форм Биркгофа-Густавсона дает удовлетворительное описание, как при классическом подходе, так и квантовом.

К примеру, квантовый спектр в $S_{\max} = 4$ приближении и соответствующие собственные векторы $|E\rangle$ находятся из следующего уравнения Шредингера

$$\hat{G}_4 |E\rangle = E |E\rangle, \quad (29)$$

которое можно, например, решить методом диагонализации, представляя вектор состояния $|E\rangle$ в виде разложения по базисному набору:

$$|E\rangle = \sum_{N,L} C_{NL} |N,L\rangle. \quad (30)$$

Используя выражения (20), находим приближенную формулу (без учета недиагональных членов) для вычисления энергетического спектра при $S_{MAX} = 4$ (общий случай)

$$E_{NL} = 1 + N + \left(\frac{3d}{2} - \frac{5b^2}{12} \right) \left(N^2 + 2N + \frac{3}{2} \right) + \left(\frac{3c}{8} - \frac{5b^2}{12} \right) \left(\frac{1}{2} N^2 - \frac{1}{2} L^2 + N + \frac{1}{2} \right) + \left(\frac{c}{8} - \frac{d}{2} \right) \left(L^2 + \frac{1}{2} \right), \quad (31)$$

если $c = 4d$ (интегрируемый случай)

$$E_{NL} = N + 1 + \left(\frac{3d}{2} - \frac{5b^2}{24} \right) \left(3N^2 + 6N - L^2 + 4 \right). \quad (32)$$

Как видно из формул (31), (32) энергетический спектр вырожден по знаку орбитального квантового момента.

В общем, для получения формулы (32) следует учесть недиагональную часть, которая при $S_{MAX} = 4$ определяется недиагональным выражением

$$\gamma(N, L) = 1/4 \cdot \sqrt{(N-L+2)(N-L+4)(N+L)(N+L-2)}, \quad (33)$$

которое присутствует как, в общем, так и в интегрируемом случае, однако, как видно энергетический спектр в обоих случаях вырожден по знаку орбитального квантового момента. Кроме того, учет вклада недиагонального элемента оказывает влияние (сдвиг) на уровни отличающиеся значением орбитального квантового числа на четыре единицы. Поэтому формулы (31), (32) с удовлетворительной точностью описывают энергетический спектр нижайших состояний в окрестности стационарной точки, расположенной в начале координат.

Аналогичным способом можно получить формулы для нижайших состояний в окрестностях других имеющихся стационарных точек, в которых потенциальная функция имеет локальный минимум.

4. Выводы и перспективы дальнейших исследований

В настоящей работе изучен конкретный класс консервативных гамильтоновых систем с двумя степенями свободы. Показано, что при произвольных значениях параметров функции Гамильтона в системе имеет место хаотический режим движения. Найдено, что при выполнении условия $c = 4d$ система является интегрируемой, и это подтверждается вычисленными сечениями Пуанкаре. Методом Биркгофа-Густавсона получена функция Гамильтона, которая при малых энергиях адекватно описывает поведение фазовых траекторий исходной системы.

Исследуемая нами система отличается от изученных в литературе систем тем, что: 1) несмотря на наличие отрицательной гауссовой кривизны на ППЭ, она при условии $c = 4d$ является интегрируемой, 2) в широком диапазоне параметров стационарные точки квадратичной части ППЭ являются вырожденными, то есть ее одно или оба собственные значения равны нулю.

На основе классической нормальной формы Биркгофа-Густавсона по правилу Вейля был получен ее квантовый аналог. Получены выражения для последующего, при надобности, вычисления энергетических спектров и соответствующих волновых функций. В частности, для нижайших уровней энергии получена формула в явном виде в потенциальной яме в начале координат. Подобные формулы аналогично могут быть получены для всех локальных минимумов, которые возможны при допустимых значениях параметров в исходной функции Гамильтона (1).

В дальнейшем планируется провести подобные исследования для других консервативных гамильтоновых систем.

ЛИТЕРАТУРА

1. Табор М. Хаос и интегрируемость в нелинейной динамике / М. Табор. – М.: УРСС, 2001. – 320 с.
2. Пуанкаре А. Избранные труды в трех томах / А. Пуанкаре, М.: Наука. Т. 2. 1972 г. – 358 с.

3. Dirac P A M. Generalized hamiltonian dynamics / P A M. Dirac // London, Proceed. Roy. Soc, 1958, vol. A 246, p. 326—332.
4. Лихтенберг А. Регулярная и стохастическая динамика / А. Лихтенберг, М. Либерман – М.:Мир, 1984. – 528с.
5. Toda M. Instability of trajectories of lattice with cubic nonlinearity / M. Toda // Phys. Lett. – 1974 – v.48 – p.335-336.
6. Кривошей И. В. Неустойчивость и стохастизация при перераспределении энергии в химической динамике / И. В. Кривошей, Г. Б. Литинский, А. В. Лузанов // Хим.физика. 1985. – Т. 4. №6. – С. 309-317.
7. Belajva I.N. Symbolic-numeric Solution of the the Two-dimensional Shroedinger Equation with Double-well Potential / Belajva I.N., Gusev A.A., Lukianenko A.N., Rostovtsev V.A., Vinitsky S.I. // Computer Algebra and Differential Equations Acta Academiae Aboensis. – 2007. – V. B67.– No. 2. – P. 78-86.
8. Штокман Х.-Ю. Квантовый хаос / Х.-Ю. Штокман – М.: Физматлит, 2004. – 376с.
9. Богачев В.Е. Символьно-численные расчеты нормальной формы, интеграла движения и сечений Пуанкаре для консервативных двумерных гамильтоновых систем / Богачев В.Е., Чеканов Н.А. // Вычислительные технологии, 2012 – т. 17. – № 4 – с. 3-13.
10. Чеканов Н. А. Квантование нормальной формы Биркгофа-Густавсона / Н. А. Чеканов // Ядерная физика. – 1989. – Т. 50. – Вып. 8. – С. 344-346.
11. Basios, V. GITA: a REDUCE program for the normalization of polynomial Hamiltonians. / V. Basios, N. A. Chekanov, B. L. Markovski, V. A. Rostovtsev, S.I. Vinitsky // Comp. Phys. Commun. – 1995. – v. 90. – p. 355 – 368.
12. Ezra G.S. Perturb: a program for calculating vibrational energies by generalized algebraic quantization / G.S. Ezra, L.E. Fried // Comp. Phys. Commun. – 1988. – v51. – p. 103-114.
13. Абрамовиц М. Справочник по специальным функциям / М. Абрамовиц, И. Стиган. М.: «Наука», 1979. – 832с.
14. Веницкий, С.И. Решение двумерного уравнения Шредингера в самосогласованном базисе / Веницкий, С.И., Инопин Е.В., Чеканов Н.А. // Препринт ОИЯИ, Р4-93-150, Дубна, 1993. – 11с.
15. Канторович, Л.В. Приближенные методы высшего анализа / Л. В. Канторович, В. И. Крылов. – Л., Физматгиз, 1962 г. – 708 с.
16. Лукьяненко А.Н. Классическая и квантовая двумерные модельные системы с пятичленным полиномиальным потенциалом / А.Н. Лукьяненко, Н.А. Чеканов // Вопросы атомной науки и техники. Серия: теоретическая и прикладная физика (РФЯЦ–ВНИИЭФ, г. Саров). – 2009. – Вып. 2. – С. 14-20.