

ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУМЕРНОЙ ГАМИЛЬТОНОВОЙ СИСТЕМЫ С ПЯТИМНЫМ ПОЛИНОМИАЛЬНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

А. Н. Лукьяненко, Н. А. Чеканов (Белгород, Россия)

Точные, т. е. решения в явном аналитическом виде для уравнения Шредингера даже в одномерном случае найдены для небольшого класса потенциалов [1], [2]. Для решения задач на собственные значения, в частности, стационарного уравнения Шредингера, разработано достаточно большое число различных методов. Перспективными современными подходами представляются комбинированные или символично-численные методы, которые сочетают аналитические преобразования с последующим численным решением исходной задачи с использованием современных компьютерных систем.

В работе рассматривается классическая и квантовая C_{4v} симметричные двумерные модельные системы с пятичным полиномиальным потенциалом. Этот гамильтониан используется в молекулярной и ядерной физике, химии и в теории поля, как некоторый вариант модели взаимодействующих полей Янга-Миллса, в которой существует динамический хаос.

Динамика классической системы описывается следующей функцией Гамильтона:

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

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

где x, y, p_x, p_y – канонически сопряженные координаты и импульсы, $V(x, y)$ – поверхность потенциальной энергии, a, b, c, d, e – параметры.

В общем случае рассматриваемая система является неинтегрируемой и в ней реализуются как регулярные, так и хаотические режимы движения. Так как область с отрицательной гауссовой кривизной на поверхности потенциальной энергии является конечной, то в рассматриваемой системе возможен переход регулярность-хаос-регулярность. При проведении численных расчетов параметры были выбраны так, что значения $V(x, y)$ во всех пяти минимумах равны нулю.

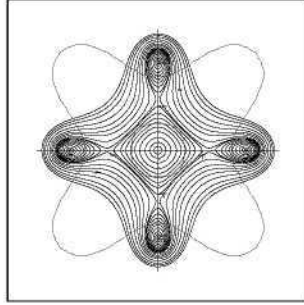


Рис. 1. Изолинии ППЭ (2) и линия (жирная) нулевой гауссовой кривизны с параметрами $b = 0.05, c = 0.01, d = 0.0001, e = 0.00005$

При разных значениях энергии E нами были вычислены сечения Пуанкаре, которые представлены на рис. 2. Как видно, в рассматриваемой системе при одной и той же энергии в разных потенциальных ямах сосуществуют два различных типа движения: хаотическое в центральном минимуме и регулярное в периферийных потенциальных ямах. При более высоких энергиях происходит восстановление регулярного характера движения, т. е. в рассматриваемой системе действительно имеет место переход регулярность-хаос-регулярность.

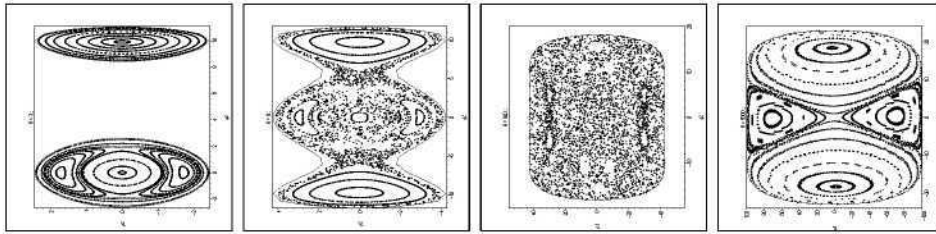


Рис. 2. Сечения Пуанкаре для классического гамильтониана (1) – (2) при энергии: а) $E = 3$, б) $E = 9$, в) E_0 , г) E_{P00}

Квантовым аналогом функции Гамильтона (1)–(2) является дифференциальный оператор Шредингера:

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

для которого надо решить задачу на собственные значения

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

где E и $\psi(x, y)$ – собственные значения и собственные функции.

Согласно методу самосогласованного базиса его решение ищется в полярных координатах r, φ в виде тригонометрического ряда, коэффициенты которого $A_0(r), A_l(r), B_l(r), l = 1, 2, \dots$ зависят от радиальной переменной и удовлетворяют, в общем бесконечной, однородной системе обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) II порядка. Эта система с учетом C_{4v} симметрии гамильтониана (1) приводится к шести системам ОДУ II порядка, соответствующим пяти неприводимым представлениям этой группы: из которых A_1, A_2, B_1, B_2 – одномерные, а E – двумерное, которые эквивалентным образом переписываются в виде систем ОДУ I порядка.

Далее из заданного диапазона значений E численно решается задача Коши с нормальными начальными условиями, и строятся общие решения полученных систем каждого типа.

С учетом граничных условий для собственных функций (волновых функций) для каждого типа состояний получены системы линейных однородных алгебраических уравнений, из которых численно найден спектр E_j . Структура их расположения в потенциале (2) приведены на рис.3.

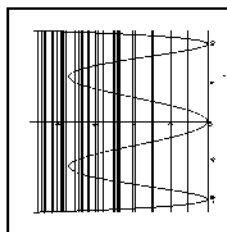


Рис. 3. Структура энергетических уровней уравнения Шредингера (4)

Литература

1. Bagrov V. G., Gitman D. M. *Exact Solutions of Relativistic Wave Equations*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht. 1990.
2. Миллер У. *Симметрия и разделение переменных*. Пер. с англ. под ред. К. И. Бабенко. М.: Мир, 1981.