

Изв. вузов «ПНД», т.11, № 2, 2003

УДК 530.145.61: 530.182

СЛОЖНАЯ ДИНАМИКА НЕАВТОНОМНОГО КВАНТОВОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

М.В. Беляев, А.Г. Лазерсон

Рассмотрена сложная динамика квантовой системы «частица в прямоугольной яме с колеблющимся дном». Показано, что анализ временных зависимостей наблюдаемых позволяет выяснить, является ли динамика регулярной или хаотической. В качестве иллюстрации представлены результаты анализа временных зависимостей для средней по ансамблю энергии. Обнаружено, что с ростом амплитуды внешнего воздействия спектр интенсивности наблюдаемой демонстрирует свойства, характерные для спектра случайного процесса, что можно интерпретировать как хаотизацию динамики.

Введение

Известно, что модели квантовых неавтономных гамильтоновых систем являются объектом чрезвычайно интенсивного изучения в теории квантового хаоса [1-17]. С одним из самых простых примеров таких систем мы встречаемся при исследовании движения частицы в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме под действием внешнего монохроматического поля. С точки зрения классической механики эта система была рассмотрена, в частности, в работе [18]. Впоследствии в работе [19] было дано исчерпывающее описание фазовых траекторий и КАМ-поверхностей, отвечающих движению частицы в прямоугольной яме, подверженной внешнему периодическому возмущению. Квантовый аналог этой задачи был исследован в работах [2-4]; было обнаружено, что при перекрытии квантовых нелинейных резонансов спектр квазиэнергий совершает переход от статистики Пуассона к распределению Вигнера. В работе [5] была проверена возможность развития техники ренормализации [1] для описания явления перекрытия резонансов. В работе [6] исследовано образование квантовых резонансов и их характеристики, отличающиеся от характеристик соответствующего классического резонанса.

В нашей статье, в отличие от указанных выше, предлагается идентифицировать сложную квантовую динамику частицы по поведению во времени наблюдаемых величин аналогично тому, как это делается при рассмотрении классических систем.

Как известно [20], в классической механике спектр интенсивности динамической величины f(t) - фурье-преобразование автокорреляционной функции этой величины. Автокорреляционная функция задается выражением

$$B(f,f,\tau) = \langle f(t+\tau)f(t)\rangle_T - (\langle f(t)\rangle_T)^2$$

(угловые скобки $\langle ... \rangle_T$ означают усреднение по времени). В случае периодической или квазипериодической динамики спектр интенсивности является дискретным, а в случае хаотической динамики - непрерывным. Если этот спектр непрерывный, то говорят, что величина f(t) обладает свойством перемешивания. Возникает вопрос: могут ли наблюдаемые величины квантовомеханической системы, которым в классическом аналоге соответствуют динамические переменные, проявлять свойство, аналогичное перемешиванию в классической механике? А именно, может ли увеличение спектрального разрешения на некотором частотном интервале привести к такому же изменению спектральной плотности наблюдаемых, какое имеет место для случайных процессов? (Напомним, что спектр случайных процессов непрерывен [21].) В данной работе мы отвечаем на этот вопрос утвердительно, демонстрируя исследование спектральных характеристик наблюдаемых на примере усредненной по ансамблю энергии частицы.

Как представляется, анализ поведения во времени наблюдаемых позволяет проследить соответствие между классической и квантовой динамикой более наглядно, чем исследование перекрытия квантовых резонансов или изучение перехода спектра квазиэнергий от распределения Пуассона к распределению Вигнера. Дело в том, что в классической механике существует непосредственный аналог усредненной по ансамблю энергии - полная энергия частицы; так же обстоит дело и с любой другой наблюдаемой в квантовой системе. При этом трудно придумать столь же простой классический аналог такой часто используемой характеристики, как распределение квазиэнергий. Что касается квантового нелинейного резонанса, то в работе [6] указывается, что перекрытие квантовых резонансов оказывается еще более сложным, чем перекрытие резонансов классических. С нашей точки зрения, дело обстоит так по следующей причине. В классической механике картина перекрытия существенно зависит от резонансов второго и более высоких поряцков. При поведения квантовомеханическом рассмотрении введение понятия «резонанс второго или более высокого порядка» затрудняется тем, что число уровней, на которых мог бы разместиться такой резонанс, заведомо ограничено. С увеличением порядка резонанса уменьшается мера области, занимаемой резонансом в фазовом пространстве (при классическом описании), или уменьшается число уровней энергии, занимаемых резонансом (при квантовомеханическом описании). Значит, при достаточно большом натуральном п для квантового резонанса п-го порядка не найдется уровней энергии - все доступные уровни заняты резонансами порядков меньших, чем п. С другой стороны, классическое фазовое пространство имеет мощность «континуум» и в нем имеются резонансы сколь угодно высоких порядков.

В качестве критерия стохастичности динамической системы будем использовать классическое условие Чирикова: для неинтегрируемой системы существует безразмерный параметр K, смысл которого заключается в следующем. Если параметр K очень мал по сравнению с единицей, стохастические слои являются очень тонкими и отделены друг от друга инвариантными кривыми. С увеличением K инвариантные кривые, разделяющие соседние резонансы и их стохастические слои, сильно искажаются и в конце концов разрушаются. В результате происходит слияние стохастических слоев и возникает так называемая «глобальная стохастичность» [20,22]. Условие Чирикова используется нами для проверки соответствия между классической и квантовой механикой. Выберем амплитуду и частоту внешнего возмущения так, чтобы параметр K был мал по сравнению с единицей, и проведем исследование поведения во времени какой-либо наблюдаемой переменной. Тогда мы вправе ожидать периодической зависимости этой переменной от времени с частотой, равной частоте внешнего возмущения. Но если мы выберем амплитуду и частоту внешнего возмущения так, чтобы параметр K был примерно равным единице или большим единицы, следует ожидать нерегулярного поведения наблюдаемой переменной, то есть появления новых частотных пиков, густота которых неограниченно возрастает с повышением точности измерений. А это и означает, что спектр становится всюду плотным (то есть практически сплошным) в некоторой области частот.

В разделе 1 приводится вывод системы уравнений для модели прямоугольной ямы с колеблющимся дном, указывается тип начального условия, для которого эта система была численно решена. В разделе 2 обсуждается проблема исследования спектральной плотности интенсивности наблюдаемой переменной. В разделе 3 проводится анализ полученных результатов.

1. Динамическая модель

В данной работе мы используем систему единиц измерения, в которой масса частицы, ширина ямы и постоянная Планка *ћ* приняты равными единице. Гамильтониан частицы в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме, подверженной внешнему гармоническому возмущению, при классическом описании имеет вид [7]

$$H(p,x,t) = \frac{1}{2}p^2 + V(x) + F_0 x \sin(\omega_0 t)$$
(1)

где F₀ - амплитуда, ω₀ - частота внешнего монохроматического поля;

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \le 1/2, \\ \infty, & |x| > 1/2. \end{cases}$$

При квантовомеханическом описании поведение частицы определяется волновой функцией $\Psi(x,t)$, удовлетворяющей уравнению Шредингера

$$\partial \Psi(x,t)/\partial t = -\frac{1}{2}\partial^2 \Psi(x,t)/\partial x^2 + F_0 x \sin(\omega_0 t) \Psi(x,t)$$
(2)

и граничным условиям $\Psi(-1/2,t)=\Psi(1/2,t)=0.$

Рассматривая систему «частица в прямоугольном ящике» как невозмущенную задачу, периодическую внешнюю силу как возмущение и следуя методу Дирака (см., например [23]), запишем решение уравнения Шредингера в виде ряда

$$\Psi(x,t) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k(t)\psi_k(x)\exp(-iE_kt),$$
(3)

где

$$\Psi_k(x) = \begin{cases} 2^{1/2} \cos(k\pi x), & k = 1, 3, 5, \dots \\ \\ 2^{1/2} \sin(k\pi x), & k = 2, 4, 6, \dots \end{cases}, \qquad E_k = k^2 \pi^2 / 2$$

соответственно собственные функции и собственные значения невозмущенной модели. Подставляя волновую функцию, записанную в виде (3), в уравнение (2), умножая полученное выражение на $\psi_m^*(x)$ (m=1,2,3,...) и проводя интегрирование по отрезку [-1/2,1/2], получим бесконечную систему уравнений относительно $a_m(t)$ - коэффициентов разложения волновой функции частицы по собственным функциям невозмущенной задачи

$$ida_m(t)/dt = \sum_{k=1}^{\infty} v_{mk}(t) \exp(i(E_m - E_k)t)a_k(t), \quad m = 1, 2, 3, \dots$$
(4)

Матричные элементы возмущения $v_{mk}(t)$ определяются выражением

$$v_m k(t) = F_0 \sin(\omega_0 t) \int_{-1/2}^{1/2} x \varphi_m^*(x) \varphi_k(x) dx.$$
 (5)

Как известно из [23], величина $|a_n(t)|^2$ представляет собой вероятность того, что при проведении измерения в момент времени t частица будет обнаружена в состоянии с энергией E_n (n=1,2,3,...).

Начальное условие зададим следующим образом:

$$a_m(0) = \delta_{mN}, \quad m = 1, 2, 3, ...,$$
 (6)

Такое начальное условие означает, что в момент времени *t*=0 частица располагается на уровне энергии с заданным номером *N*. После того как получено решение системы (4), можно построить зависимость от времени любой наблюдаемой величины и исследовать ее поведение.

2. Исследование спектральной плотности интенсивности

Вычисление спектральных составляющих производится по стандартной процедуре, которая заключается в следующем [21,24]. На основе численного решения системы (4) строится зависимость наблюдаемой переменной от времени (временная реализация). Длина этой реализации *T* сначала выбирается произвольно. Затем вычисляется выборочная автокорреляционная функция наблюдаемой и нормированная спектральная плотность интенсивности (далее будем писать короче - спектр). Выборочная автокорреляционная функция записывается в виде

$$s_k = c(k)/c(0), \quad k = 0,...,M-1$$
 (7)

с выборочной автоковариационной функцией

$$c(u) = 1/M \sum_{t=1}^{M-u} (x_t - \bar{x}) (x_{t+u} - \bar{x})$$
(8)

и средним значением по времени

$$\bar{x} = 1/M \sum_{t=1}^{M} x_t.$$
 (9)

В формулах (7)-(9) M - количество наблюдений и $(x_t)_{t=1}^{M}$ - последовательность измеренных значений наблюдаемой переменной.

Формулу (7) используем для вычисления спектра. Запишем формулу для спектра в виде

$$S_m = 1/M \sum_{k=0}^{M} s_k \cos(2\pi km/M).$$
(10)

Здесь $(s_k)_{k=0}^{M}$ - конечный дискретный временной ряд для выборочной автокорреляционной функции. Для вычисленного спектра шаг дискретизации по частоте однозначно определяется длиной реализации *T* наблюдаемой переменной ($\Delta f=1/T$).

Далее строится временная реализация того же процесса на удвоенном временном интервале 2*T*, рассчитываются ее корреляционная функция и спектр. При этом шаг дискретизации по частоте становится в два раза меньше. Этот процесс продолжается до тех пор, пока значения амплитуд всех вычисленных спектральных составляющих не стабилизируются. Если спектр не является всюду плотным, то амплитуды спектральных составляющих на промежуточных частотах либо равны нулю, либо вследствие погрешности численного метода спектрального анализа достаточно малы (обычно порядка минус пятьдесят децибел). Для всюду плотного спектра эти амплитуды значительно превышают указанный уровень и сравнимы по величине с амплитудами, определенными на предыдущем этапе.

3. Результаты расчетов

Для классического аналога рассматриваемой динамической системы параметр стохастичности К записывается в соответствии с [20] в виде

$$K = 2\pi^3 F_0 / \omega_0^2.$$
(11)

Как легко видеть из этой формулы, величина К зависит только от амплитуды и частоты внешнего поля. Так как оба эти параметра полностью сохраняют свой физический смысл при переходе от классического рассмотрения к квантовомеханическому, формула (11) может использоваться и в квантовой задаче.

В данной работе система (4) решалась численно для K=0.01, 1.0 и 2.0, то есть в соответствии с формулой (11) были соответствующим образом подобраны значения амплитуды и частоты внешнего возмущения. Начальное условие выбиралось так, чтобы частица в момент времени t=0 находилась на 150-м уровне. Частота возмущения ω_0 задавалась так, чтобы она совпадала с частотой перехода между 150 и 151-м уровнями. Интервал времени, на котором получено решение системы (4), составил 5000 периодов колебаний внешнего поля для случая K=0.01 и 150 периодов колебаний внешнего поля для случаев K=1.0 и K=2.0. Опибка нормализации ($\sum_{k=1}^{\infty} |a_k(t)|^2 = 1$) для всех трех значений K не превышала $3 \cdot 10^{-3}$.

В качестве примера наблюдаемой переменной для рассматриваемой системы была выбрана средняя по ансамблю энергия частицы. Как известно из [23], в квантовой системе с финитным движением средняя энергия определяется формулой

$$E(t) = \sum_{n} |a_{n}(t)|^{2} E_{n}, \qquad (12)$$

где E_n -собственные значения невозмущенной задачи.

При построении численного решения для K=0.01 мы ограничились учетом уровней энергии от 100-го по 200-й. Для K=0.01 на рис. 1 показан график средней энергии, а на рис. 2 выборочный спектр средней энергии. Рис. 2 позволяет утверждать, что для малых амплитуд возмущения спектр заведомо является дискретным с небольшим количеством (не более десятка) частотных пиков. Кажущаяся непрерывность спектра вокруг пиков $0.1\omega_0$ и $0.3\omega_0$ должна быть отнесена на счет боковых лепестков. В самом деле, характер зависимости спектральных составляющих от частоты в небольшой окрестности точки $0.1\omega_0$ качественно совпадает с боковыми лепестками для прямоугольного окна [24]. Кроме того, мы обнаружили, что основная мощность имеет место на низких частотах, не превышающих $0.75\omega_0$, а частоте колебаний частицы ω_0 соответствует пик значительно меньшей интенсивности.

При построении численного решения для K=1.0, мы ограничились учетом энергетических уровней с 50-го по 250-й. Для этого случая на рис. 3 показан график средней энергии, на рис. 4 представлен спектр средней энергии для всего







Рис. 2. Спектральная плотность интенсивности среднего по ансамблю от энергии частицы при значении управляющего параметра K=0.01

временного интервала реализации, на рис. 5 изображен сравнительный график спектров средней энергии для первой четверти и всего временного интервала реализации в области низких частот. Рис. 3 демонстрирует, что средняя энергия как функция времени ведет себя подобно реализации случайного процесса. На рис. 4 показано, что высокая мощность сосредоточена на низких частотах, а именно, в интервале частот от нуля до ω₀/3; начиная с этого значения частоты, мощность резко снижается. Отдельные заметные всплески мощности можно наблюдать и в окрестности частоты, равной удвоенной частоте колебаний внешнего поля. Обратим внимание на то, что на этой частоте имеется одинокий острый пик. Это, по-видимому, является квантово-механическим аналогом так называемого параметрического резонанса. Это известный феномен классической механики [25,26], который имеет место в системе с изменяющимися во времени параметрами и проявляется, в частности, в том, что максимум амплитуды колебаний приходится на частоту, равную удвоенной частоте внешнего воздействия. Сравнивая изображенные на рис. 5 спектры средней энергии для первых 37.5 и первых 150 периодов колебаний внешнего поля, отметим, что спектральная плотность интенсивности средней энергии проявляет такое свойство, как неограниченное сгущение спектральных линий с уменьшением шага по

S





Рис. 3. Реализация среднего по ансамблю от энергии частицы при значении управляющего параметра K=1.0

Рис. 4. Спектральная плотность интенсивности среднего по ансамблю от энергии частицы при значении управляющего параметра K=1.0





Рис. 5. Сравнение вычисленных значений спектральной плотности интенсивности для разных интервалов реализации среднего по ансамблю от энергии частицы при значении управляющего параметра K=1.0 на низкочастотном интервале



частоте. Именно в этом смысле можно говорить о том, что спектр наблюдаемой является сплошным.

При построении численного решения для K=2.0, мы ограничились учетом первых 300 энергетических уровней. Для этого случая на рис. 6 показан график средней энергии, на рис. 7 представлен спектр средней энергии для всего временного интервала реализации, на рис. 8 изображен сравнительный график спектров средней энергии для первой четверти и всего временного интервала реализации в области низких частот, если сравнить графики на рис. 3 и 6 (графики временных реализаций средней энергии для случаев K=1.0, и K=2.0, соответственно), то можно заметить, что средняя энергия на рис. 6 колеблется с несколько большей амплитудой и, в основном, с большей частотой, нежели средняя энергия на рис. 3. Можно заметить, что при K=2.0 мощность заметно спадает, начиная с частоты, равной приблизительно $\omega_0/2$ (а не $\omega_0/3$, как при K=1.0). Что касается сравнения изображенных на рис. 8 спектров средней энергии для первых 37.5 и первых 150 периодов колебаний внешнего поля, скажем, что спектр средней энергии при K=2.0 также может рассматриваться как непрерывный по аналогии со спектром на рис. 5.





Рис. 7. Спектральная плотность интенсивности среднего по ансамблю от энергии частицы при значении управляющего параметра K=2.0



Изложенные результаты позволяют сделать следующие выводы. В полном соответствии с классической динамикой поведение неавтономной квантовой системы сводится к одному из двух случаев.

1. Классический аналог рассматриваемой системы показывает, что области стохастичности существуют лишь в очень малых окрестностях сепаратрис и отделены друг от друга. Тогда при квантовом рассмотрении наблюдаемая величина обнаруживает только дискретный спектр.

2. Классический аналог переходит к глобальной стохастичности, то есть нелинейные резонансы перекрываются, сепаратрисы разрушаются и области стохастичности сливаются друг с другом. Тогда при квантовом рассмотрении спектральная плотность интенсивности наблюдаемой проявляет такое свойство, как появление все новых и новых частотных пиков с уменьшением шага по частоте. Такое сгущение, по-видимому, неограниченно, что и позволяет сравнить полученный спектр наблюдаемой с непрерывным спектром случайного процесса.

Итак, при квантовом рассмотрении гамильтоновой системы исследование переменной во времени наблюдаемой величины позволяет идентифицировать динамику данной системы. Поэтому поведение во времени наблюдаемых значений - средних по ансамблю - физических величин (энергии, импульса и др.) может служить критерием регулярности поведения квантовых систем.

Библиографический список

1. Reichl L.E. The transition to chaos in conservative classical systems: quantum manifestations. New York: Springer-Verlag, 1992.

2. Reichl L.E., Lin W.A. Exact quantum model of field-induced resonance overlap // Phys. Rev. A. 1986. Vol. 33. P. 3598.

3. Lin W.A., Reichl L.E. Transition of spectral statistics due to overlap of quantum resonance zones // Phys. Rev. A. 1987. Vol. 36. P. 5099.

4. Lin W.A., Reichl L.E. Spectral analysis of quantum resonance zones, quantum Kolmogorov-Arnold-Moser theorem and quantum resonance overlap // Phys. Rev. A. 1988. Vol. 37. P. 3972.

5. Reichl L.E., Li Haoming. Self-similarity in quantum dynamics // Phys. Rev. A. 1990. Vol. 42. P. 4543.

6. Ju-Yong Shin and Hai-Woong Lee. Floquet analysis of quantum resonance in a driven nonlinear system // Phys. Rev. E. 1994. Vol. 50. P. 902.

7. Holthaus M. On the classical-quantum correspondence for periodically time dependent systems // Chaos, Solitons & Fractals. 1995. Vol. 5. P. 1143.

8. Cocke S., Reichl L.E. Static-field effects on the nonlinear quantum resonances and the ionization spectrum of a simple bound particle // Phys. Rev. A. 1995. Vol. 52. P. 4515.

9. Farini A., Boccaletti S., Arecchi F.T. Quantum-classical comparison in chaotic systems // Phys. Rev. E. 1996. Vol. 53. P. 4447.

10. Morrow G.O., Reichl L.E. Planck's-constant dependence of the scaling of localization length in quantum dynamics // Phys. Rev. E. 1998. Vol. 57. P. 5266.

11. Demikhovskii V.Y., Kamenev D.I., Luna-Acosta G.A. Quantum weak chaos in a degenerate system // Phys. Rev. E. 1999. Vol. 59. P. 294.

12. Mirbach B., Casati G. Transition from quantum ergodicity to adiabaticity: dynamical localization in an amplitude modulated pendulum // Phys. Rev. Lett. 1999. Vol. 83. P. 1327.

13. Loinaz W., Newman T.J. Quantum revivals and carpets in some exactly solvable systems // J. Phys. A: Math. Gen. 1999. Vol. 32. P. 8889.

14. Timberlake T., Reichl L.E. Phase-space picture of resonance creation and avoided crossings // Phys. Rev. A. 2001. Vol. 64. P. 033404.

15. Sankaranarayanan R., Lakshminarayan A., Sheorey V.B. Quantum chaos of a

particle in a square well: Competing length scales and dynamical localization // Phys. Rev. E. 2001. Vol. 64. P. 046210.

16. Emmanouilidou A., Reichl L.E. Floquet scattering and classical-quantum correspondence in strong time-periodic fields // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 65. P. 033405.

17. Korsch H. J., Leyes W. Quantum and classical phase space evolution: a local measure of delocalization // New J. Phys. 2002. Vol. 4. P. 62.

18. Lin W.A., Reichl L.E. External field induced chaos in an infinite square well potential // Physica D. 1986. Vol. 19. P. 145.

19. Fuka M.Z., McIver J.K., Becker W., Orszag M., Ramirez R. Driven particle in an infinite square well: Representation and breakdown of the invariant tori in a multipleresonance case // Phys. Rev. E. 1995. Vol. 51. P. 1935.

20. Заславский Г.М. Стохастичность динамических систем. М.: Наука, 1984.

21. Дженкинс Г., Ваттс Д.Спектральный анализ и его приложения. М.: Мир, 1971.

22. Лихтенберг А., Либерман М. Регулярная и стохастическая динамика. М.: Мир, 1984.

23. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1989.

24. Марпл-мл. С.Л. Цифровой спектральный анализ и его приложения. М.: Мир, 1990.

25. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. М.: Наука, 1988.

26. Рабинович М.И., Трубецков Д.И. Введение в теорию колебаний и волн. М.: Наука, 1992.

Саратовский государственный университет Поступила в редакцию 5.01.01 после переработки 21.01.03

COMPLEX DYNAMICS OF A QUANTUM OSCILLATOR

M.V. Belyaev, A.G. Lazerson

Complex dynamics of a quantum periodically driven square well is considered. It is shown that analysis of its ensemble average energy time series provides an identification of its dynamics to be either regular or chaotic. It has been found that enhancement of the driving force causes the energy spectrum to look like a spectrum of some random process, which may be identified as the signature of chaos in a quantum system.



Беляев Михаил Васильевич - родился в 1978 году в Саратове. Окончил физический факультет Саратовского государственнго университета им. Н.Г. Чернышевского в 2000 году. Аспирант кафедры теоретической и математической физики СГУ. Область научных интересов - хаотическая динамика в квантовомеханических системах. Принимал участие в школеконференции «Нелинейные дни в Саратове для молодых - 2001» и международной конференции SYNCHRO-2002.



Лазерсон Александр Григорьевич - родился в 1945 году. Окончил физический факультет СГУ (1969) по специальности физик-теоретик. С 1969 по 1996 год работал в теоретическом отделе ГНПП «Алмаз» (Саратов). Защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата физикоматематических наук (1983) и доктора физико-математических наук (1996) по специальности «Радиофизика». С 1996 года профессор кафедры теоретической и математической физики СГУ. Читает курсы лекций по дисциплинам «Квантовая теория» и «Квантовый хаос». Основные направления научной деятельности: статистическая радиофизика, электроника СВЧ, акустоэлектроника, нелинейная динамика и динамический хаос. Автор более 150 научных публикаций. Член-корреспондент Академии военных наук РФ, член IEEE с 1997 года.