

耦合系统混沌态的半经典量子化

程荣贵, 杨双波

(南京师范大学物理科学与技术学院, 江苏 南京 210097)

[摘要] 运用绝热定理的方法研究耦合系统混沌态的半经典量子化. 发现对于合适选择的零级哈密顿量, 经典混沌态和规则态的量子化结果, 在绝热近似下有相近的精度. 这个量子化方法可以很容易地直接应用到多自由度系统.

[关键词] 耦合系统, 混沌态, 半经典量子化, 绝热近似

[中图分类号] O413.1 [文献标识码] A [文章编号] 1001-4616(2009)04-0055-04

Semiclassical Quantization of Chaotic States for a Coupled System

Cheng Ronggui Yang Shuangbo

(School of Physics and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing 210097, China)

Abstract By the method of adiabatic theorem, this paper studies the semiclassical quantization of a chaotic state for a coupled system. It is found that for a properly chosen zeroth order Hamiltonian, under adiabatic approximation, the result of quantization for both the chaotic state and the regular state has the similar precision. This method of quantization can be easily applied to multidimensional system.

Key words coupled system, chaotic state, semiclassical quantization, adiabatic approximation

低维束缚系统的半经典量子化处理, 多年来备受关注. 半经典量子化常用的方法是研究满足 EBK 量子化条件^[1-3]的特殊的量子化轨迹, 能量本征值的半经典近似值由这些特殊量子化轨迹给定. 这些轨迹随着时间演变将横扫相空间中的不变环面. 这种方法的关键是要从数值上研究 初值条件空间, 对于不可分离耦合系统, 由于混沌的存在, 这种研究程序从数值上变得难处理, 从而导致该方法不可用. 本文描述一种解决问题的方法——绝热近似, 处理耦合系统混沌态的半经典量子化: 对于不可分离耦合系统, 它回避了研究 初值条件空间 的必要性, 简化了局域化量子化轨道的步骤; 应用绝热近似, 更容易获得经典混沌结果. 它的本质由 Ehrenfest^[4]阐明, 后来 Grodzanov and Shteyn^[5]应用它计算正交电磁场系统中的氢原子, 最近 Johnson 把它应用到化学问题中去. 本文中, 笔者首先分析耦合系统满足的运动微分方程, 然后应用数值计算, 得出用绝热近似处理耦合系统混沌态的半经典量子化的本征能量值, 并与准确结果进行对照, 最后进行分析讨论.

1 绝热近似方法

假定 N 维耦合系统由如下哈密顿量 H 给定:

$$H = H_0 + H_1, \quad (1)$$

H_0 表示一个可分离的零级近似, 而 H_1 为不可分离项, 原则上要求 H_1 比 H_0 小很多. 首先, 对可分离的零级近似 H_0 的运动进行量子化, 这需要满足 EBK 量子化条件:

$$p_i \, dx_i = h(n_i + 1/2), \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2)$$

收稿日期: 2008-09-09

基金项目: 国家自然科学基金 (10674073) 资助项目.

通讯联系人: 杨双波, 教授, 研究方向: 理论物理及非线性物理. E-mail: yangshuangbo@njnu.edu.cn

对于每一个可分离模型, 如果零级近似的频率是非退化的, 那么非耦合的相点将扫过 N 维零级不变环面, 这个不变环面可以由作用量 (方程式 (2)) 的值标志, 然而, 我们的目标是找出由 H 决定的整个动力学状态的量子化轨道. 为此, 我们回忆经典动力学的绝热定理, 此定理认为如果含时哈密顿量 $H(t)$ 变化足够慢, 而且瞬时频率不为零, 那么由含时哈密顿量 $H(t)$ 产生的束缚态轨迹的作用量是守恒的. 据此, 考虑下面的含时哈密顿系统:

$$H(t) = H_0 + \chi(t) H_1,$$

(3)

$\chi(t)^{[6]}$ 是启闭函数, 取:

$$\chi(t) = t/T - \frac{\sin(2\pi t/T)}{2}, \quad 0 \leq t \leq T,$$

(4)

整个启闭时间为 T , $\chi(t)$ 从 0 到 1 的变化过程, 是足够缓慢、光滑变化的. $t = 0$ 时 $\chi(0) = 0$, $t = T$ 时 $\chi(T) = 1$ 对应于 H_0 的不变环面上的初值条件, 应用含时哈密顿量 $H(t)$ 做出经典轨迹. 即: 轨迹将从对于 H_0 的 EBK 量子化不变环面自然演变到 H 的 EBK 量子化不变环面. 在启闭过程中 (H 是绝热不变量), 获得的最终能量值就是半经典能量本征值. 原则上, 对于每一个本征值只需要任一单一轨道, 如果对半经典能量本征值的精度要求很高, 可以随机选择零级环面上的初值条件, 并对所有结果进行平均, 这样可能比仅增加启闭时间 T 获得更准确的结果.

2 正则方程及庞加莱截面

这里, 我们所研究的系统是两个耦合的线性振子, 其哈密顿量为 $H(t) = H_0 + \chi(t) H_1$

$$H_0 = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2 + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}y^2),$$
$$H_1 = -\frac{1}{2}xy(x^2 + y^2),$$

(5)

其中 $\omega_1 = 1$, $\omega_2 = \sqrt{2}$, $\omega_1/\omega_2 = 1/6$, $\omega_2/\omega_1 = 2/3$. 据此哈密顿量, 可以写出含时耦合系统的运动微分方程如下:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= p_x, \\ \dot{y} &= p_y, \\ \dot{p}_x &= -\frac{1}{2}x - 2\chi(t)xy, \\ \dot{p}_y &= -\frac{1}{2}y - \chi(t)(x^2 + 3y^2), \end{aligned}$$

(6)

其中 $\chi(t)$ 是启闭函数, 由 (4) 式给出, 在求解正则方程 (6) 式之前, 我们先做出此哈密顿量的势能 $V = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}y^2) - \frac{1}{2}xy(x^2 + y^2)$ 的等势线. 如图 (1) 所示,

V 存在 1 个极小点 (0, 0) 和 3 个鞍点 (0, 6), (3, $\sqrt{5}$), (3, -3), 离解能为 12. 我们考虑束缚耦合系统的混沌态, 因此要求:

- (1) 束缚系统的总能量 $E < 12$;
- (2) 对混沌态进行半经典量子化.

显然, 第 (1) 条很容易满足, 但是第 (2) 条怎样进行确定, 此时需要借助庞加莱截面^[7]进行分析. 我们可以观察不同能量情况下庞加莱截面特性, 寻找耦合系统的混沌态进行半经典量子化. 如图 2 所示, 我们做出不同能量下的庞加莱截面 ($x = 0, p_x < 0$), 对应图 2 中 (a), (b), (c), (d), (e), (f) 的能量分别为 1.204, 6.2595, 9.5524, 6.7067, 8.9444, 11.7410. 可以看到低能态 (a), (b), (c), 经典运动是规则的, 混沌从 (d) 开始出现, 到 (f) 时, 混沌充满相空间, 此时的能量接近离解能.

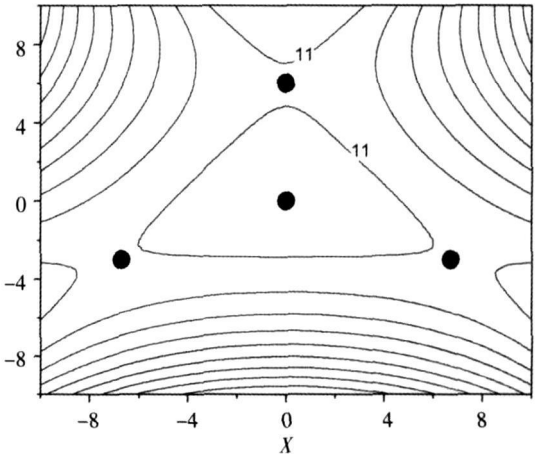


图 1 势能函数的等高线

Fig.1 Contour line of the potential energy function

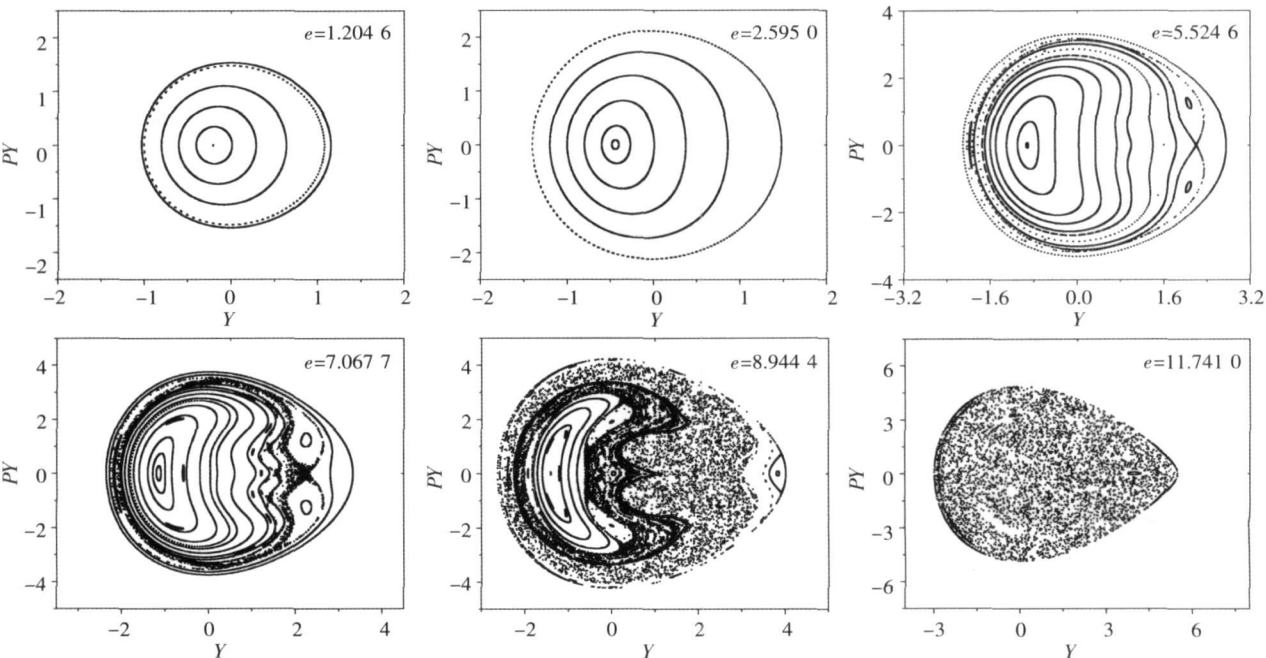


图 2 Hamilton 系统的庞加莱截面, 能量 E 依次为 1.204 6, 2.595 0, 5.524 6, 7.067 7, 8.944 4, 11.741 0

Fig.2 Poincare surface of section of Hamilton system, energy E is 1.204 6, 2.595 0, 5.524 6, 7.067 7, 8.944 4, 11.741 0 respectively

3 绝热近似^[6] 半经典量子化

从图 (2) 得知, 能量 $E = 8\ 944\ 4$ 态主要是经典混沌态和谐振态, 我们选择此能量进行绝热近似半经典量子化. 通过改变随着不变环面变化的通路, 使其回避强共振区域. 这可通过选择一个不同的零级哈密顿量 H_0 达到. 这里我们可以通过对原非耦合哈密顿量加一可分离项来完成. 当然新的零级哈密顿量要满足下面的量子化条件:

$$p_x \quad dx = h(n_1 + 1/2), \tag{7}$$

$$p_y \quad dy = h(n_2 + 1/2). \tag{8}$$

对于能量 $E = 8\ 944\ 4$ 态, 我们发现, 当添加项取为 $g(x) = -0\ 007\ 01x^2$ 时, 用绝热启闭方法可以得到满意的结果, 如表 1 所示. 因此, 取 $g(x) = -0\ 007\ 01 \quad x^2$.

$$H_0 = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2 + \frac{2}{1} \quad x^2 + \frac{2}{2} \quad y^2) + g(x), \tag{9}$$

$$H_1 = \quad y \quad (x^2 + \quad y^2) - g(x).$$

表 1 耦合系统的绝热能级

Table 1 Adiabatic energy levels for the coupled system

零级态 (n_1, n_2)	时间 (T)	零级能量 (E_0)	绝热近似 (E_a)	准确能量 (E)	方均根误差 (E_{ms})
(0, 0)	20 000	1 207 1	1 204 8	1 204 6	0 24E - 9
	40 000		1 204 8		0 90E - 9
(0, 1)	20 000	2 621 3	2 595 4	2 595 0	0 17E - 8
	40 000		2 595 4		0 38E - 8
(3, 1)	20 000	5 621 3	5 526 2	5 524 6	0 13E - 8
	40 000		5 526 2		0 32E - 8
(6, 0)	20 000	7 207 1	7 067 4	7 067 7	0 58E - 4
	40 000		7 067 5		0 60E - 4
(1, 5)	20 000	9 277 0	8 942 0	8 944 4	0 31E - 3
	40 000		8 936 9		0 56E - 3
(7, 3)	20 000	12 449 0	11 741 8	11 741 0	0 32E - 2
	40 000		11 743 7		0 31E - 2

其中 $\alpha_1 = 1, \alpha_2 = \sqrt{2}, \alpha_3 = 1/6, \alpha_4 = -2/3$

4 结果及讨论

表 1 及本文中的物理量均采用原子单位 (a.u.). 态 (1, 5) 对应零级哈密顿量 H_0 的能量 $E_0 = 9.2770$ 而对应于整个哈密顿量 $H(t) = H_0 + H_1$ 的准确能量值为 $E = 8.9444$, 绝热近似能量为 $E_a = 8.9420$ 这里, 我们应用两种启闭时间 $T = 20000$ 和 $T = 40000$ 计算. 图 2 中其他庞加莱截面对应的能量在绝热近似情况下计算的结果也列入表 1 中, 以与态 (1, 5) 的量子化结果进行对照. 观察以上结果, 我们认为绝热近似方法不失为计算不可分离耦合系统混沌态的一种好的计算方法; 当然对于不同的混沌态, 可以选择不同的合适的 $g(x)$, 在这里不再枚举. 表 1 中的最后一列是这样产生的: 我们在计算半经典能量时, 任意选取 9 条同在一个零级哈密顿量环面上的不同的初始轨迹 (即初始条件) 算出的能量的方均根误差. 从表 1 可以看出, 虽然在启闭时间变长时方均根误差 (E_{ms}) 增大了, 然而总体上这个值还是非常小的; 只是在系统处于混沌海的情况下, 方均根误差 (E_{ms}) 迅速变大. 即便如此我们仍然可以得出比较好的结果, 这应该是混沌系统特有的属性.

[参考文献]

[1] Einstein A. Zum quantensatz von Sommerfeld und Epstein [J]. Verh Dtsch Phys Ges 1917, 19: 82-92
[2] Brillouin L. Remarques sur la mécanique ondulatoire [J]. Phys Radium, 1926, 7(12): 353-368
[3] Keller J.B. Corrected Bohr-Sommerfeld quantum conditions for nonseparable systems [J]. Ann Phys, 1958, 4(2): 180-188
[4] Ehrenfest P. Kon Versägen Sources of Quantum Mechanics[M]. Amsterdam: Akad, 1916: 412-433.
[5] Grodzanov T.P., Slov'ev E.A. Semiclassical quantisation of the hydrogen atom in crossed electric and magnetic fields [J]. Phys B, 1982, 15(8): 1195-1204.
[6] Skodje R.T., Borondo E., Reinhardt W.P. The semiclassical quantization of nonseparable systems using the method of adiabatic switching [J]. Chem Phys, 1985, 82(10): 4611-4632
[7] Noz D.W., Marcus R.A. Semiclassical calculation of bound state in a multidimensional system for nearly 1:1 degenerate systems [J]. Chem Phys, 1977, 67(2): 559-567

[责任编辑: 顾晓天]

(上接第 54 页)

[8] Jiang P., Bertone J.F., Hwang K.S. et al. Single-crystal colloidal multilayers of controlled thickness[J]. Chem Mater, 1999, 11(8): 2132-2140
[9] Xia Y.N., Gates B., Yin Y.D., et al. Monodispersed colloidal spheres: old materials with new applications[J]. Adv Mater, 2000, 12(10): 693-713.
[10] Velev O., Lenhoff D., Abraham M. Colloidal crystals as templates for porous materials[J]. Current Opinion in Colloid & Interface Sci, 2000, 5: 56-63.
[11] Ye Y.H., LeBlance F., Hache A., et al. Self-assembling three-dimensional colloidal photonic crystal structure with high crystalline quality[J]. Appl Phys Lett, 2001, 78(1): 52-54.
[12] Woodcock L.V. Entropy difference between the face-centred cubic and hexagonal close-packed crystal structures[J]. Nature London, 1997, 385: 141-143
[13] Bruce A.D., Wilding N.B., Ackland G.J. Free energy of crystalline solids: a lattice-switch Monte Carlo method[J]. Phys Rev Lett, 1997, 79(16): 3002-3005.
[14] Kopnov F., Smirnov V.L., Davidov D. Self-assembled colloidal photonic crystals[J]. Synthetic Met, 2003, 137: 993-995.

[责任编辑: 顾晓天]