АНАЛИЗ ХАОТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ СПЕКТРА ДВАЖДЫ ВОЗБУЖДЁННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМА ГЕЛИЯ И ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРАМЕТРА БРОДИ

А.А. Киселёв, И.Ю. Юрова

Санкт-Петербургский государственный университет,
Научно-исследовательский институт физики,
ул. Ульяновская, 1, Петергоф, Санкт-Петербург, 198504, Россия
e-mail: antkiselyov@rambler.ru, inna.yurova@IJ15700.spb.edu

В данной работе атом гелия рассматривается как неинтегрируемая в квантово-механическом смысле (т.е. хаотическая) система. Описывается метод приближённого решения уравнения Шрёдингера для атома гелия: точное отделение вращательных переменных-углов Эйлера и приближённое разделение радиальных переменных (в качестве которых берутся гиперсферические координаты), которое оказывается возможным при учёте существовании их иерархии. К полученному энергетическому спектру дважды возбуждённых состояний применяется статический анализ, в рамках которого вычисляется параметр Броди, являющийся мерой хаотичности системы.

Введение

В настоящей работе проводится хаотический анализ спектра атома гелия. В отличие от атома водорода, атом гелия не является интегрируемой системой (как в классическом, так и в квантовом понимании) и даже в отсутствии внешних полей проявляет некоторую хаотичность при исследовании структуры спектра. Другими известными примерами хаотических систем являются атомы в сильно возбужденных состояниях в присутствии внешних полей, нелинейные осцилляторы, а также квантовые бильярды. Квантовый хаос представляется сравнительно молодой научной темой: большинство работ, включающих описание структуры квантового хаоса, было создано в прошедшие два десятилетия. В них затрагиваются различные методы: сопоставление с классическим хаосом [1, 2], квазиклассические методы [3], некоторые математические модели [4, 5]. В работе [6] описываются статические характеристики нерегулярного спектра. В работе [7] выделяются критерии квантового хаоса, а также рассматриваются некоторые стохастические системы. Обзор большинства методов дан в монографиях [8, 9]. Анализ хаотической структуры высоковозбужденных состояний атома гелия приведён в [10]. Во втором параграфе описано решение уравнения Шредингера в адиабатическом приближении. В третьем параграфе затрагивается статический анализ спектра, в рамках которого строится гистограмма распределения межуровневых расстояний спектра и вычисляется параметр Броди.

Решение уравнения Шредингера и вычисление спектра атома гелия

В рамках модели, представляющей атом гелия как трехатомную вращающуюся молекулу, рассмотрим систему электрон-электрон-ядро в подвижной системе координат, поворот к которой из неподвижной системы ($XYZ \to X'Y'Z'$) осуществляется углами Эйлера α, β, γ. Ось Z' выберем по медиане треугольника, в вершинах которого расположены два электрона и ядро.

Через $\vec{r_1}$ и $\vec{r_2}$ обозначим радиусы-векторы электронов, через $\theta = \vec{r_1}\,\hat{}\,\vec{r_2}$ – угол между векторами $\vec{r_1}$ и $\vec{r_2}$. Запишем гамильтониан атома гелия:

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \qquad (1)$$

где Z – заряд ядра, r_{12} – межэлектронное расстояние.

Полная волновая функция системы позволяет отделить вращательные переменные (см.[11]):

$$\psi_{LM}(\vec{r_1},\vec{r_2}) = \sum_{K=0}^{L} f_{LK}^{+}(r_1,r_2,\theta) D_{MK}^{L+}(\Omega) + f_{LK}^{-}(r_1,r_2,\theta) D_{MK}^{L-}(\Omega) \qquad (2)$$

$$\Omega = \{\alpha,\beta,\gamma\},$$

$$D_{MK}^{L+} = (\sqrt{2} + (2-\sqrt{2})\delta_{0K})^{-1}[D_{MK}^{L} + (-1)^K D_{M-K}^{L}],$$

$$D_{MK}^{L-} = (i\sqrt{2})^{-1}[D_{MK}^{L} - (-1)^K D_{M-K}^{L}]$$

$D_{MK}^{L}(\Omega) - D$-функция Вигнера, зависящая от углов Эйлера Ω, L – суммарный орбитальный момент системы, M, K – его проекции на оси Z, Z' соответственно.

Вводя гиперсферические координаты (гиперсферический радиус $R = \sqrt{r_1^2 + r_2^2}$, гиперугол $\alpha = \mathrm{arctg}(r_1/r_2)$ и угол между радиусами-векторами электронов ϑ) и переходя от координат $\{r_1, r_2, r_{12}\}$ к координатам $\{R, \alpha, \vartheta\}$, для P^e-состояния придем к такому уравнению:

$$\left[\frac{5}{R}\frac{\partial}{\partial R} + \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R^2}\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + \frac{4}{R^2} ctg 2\alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} + \right.$$
$$\frac{1}{R^2 \sin^2\alpha \cos^2\alpha}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{2Z(\sin\alpha + \cos\alpha)}{\sin\ \alpha \cos\ \alpha} - \qquad (3)$$
$$\left.\frac{2\lambda}{R\sqrt{1-\sin 2\alpha\cos\theta}} - \frac{1}{R^2\sin^2\alpha\cos^2\alpha}\frac{1}{\sin^2\theta} + 2E\right] f_{10}(\theta,\alpha,R) = 0$$

Воспользуемся адиабатическим приближением, базирующемся на иерархии изменения переменных в данной задаче: θ – наиболее быстрая, α – менее быстрая, R – наиболее медленная переменная [7].

Ограничимся симметричной моделью Ваннье $(\theta \approx \pi, \alpha \approx \frac{\pi}{4})$.

Последовательно решая 3 уравнения (в порядке, определяемом иерархией переменных) и проводя квантование по 3 переменным, получим энергию как функцию трех аргументов:

$$E = E(n_\theta, n_\alpha, n_R),$$

где $\{n_\theta, n_\alpha, n_R\}$- набор квантовых чисел, получаемых при квантовании уравнений по соответствующим переменным(см таблицу 1).

Таблица 1. Значения энергии дискретного спектра атома гелия (число N нумерует уровни).

N	n_θ	n_α	n_R	$-E$(a.e.)
1	2	1	0	0.537690
2	2	1	1	0.253790
3	2	1	2	0.149133
4	2	1	3	0.098014
5	2	1	4	0.069314
6	2	1	5	0.051958
7	2	1	6	0.040340
8	2	1	7	0.032354
9	2	2	0	0.422262
10	2	2	1	0.214572
11	2	2	2	0.130701
12	2	2	3	0.088078
13	2	2	4	0.065013
14	2	2	5	0.048109
15	2	2	6	0.037886
16	2	2	7	0.030812
17	2	3	0	0.319837
18	2	3	1	0.175095
19	2	3	2	0.110572
20	2	3	3	0.076848
21	2	3	4	0.056963
22	2	3	5	0.044614
23	2	3	6	0.036806
24	2	3	7	0.031924
25	3	1	0	0.533166
26	3	1	1	0.253387
27	3	1	2	0.148928
28	3	1	3	0.097879
29	3	1	4	0.069280
30	3	1	5	0.051918
31	3	1	6	0.040309
32	3	1	7	0.032330
33	3	2	0	0.421491
34	3	2	1	0.214307
35	3	2	2	0.131049
36	3	2	3	0.087949
37	3	2	4	0.063378
38	3	2	5	0.048079
39	3	2	6	0.037862
40	3	2	7	0.030830
41	3	3	0	0.319443
42	3	3	1	0.174943
43	3	3	2	0.110498
44	3	3	3	0.076796
45	3	3	4	0.056925
46	3	3	5	0.044607
47	3	3	6	0.036862
48	3	3	7	0.031973
49	4	1	0	0.532650
50	4	1	1	0.253275
51	4	1	2	0.148831
52	4	1	3	0.097898
53	4	1	4	0.069263
54	4	1	5	0.051905
55	4	1	6	0.040299
56	4	1	7	0.032321
57	4	2	0	0.421171
58	4	2	1	0.219788
59	4	2	2	0.130499
60	4	2	3	0.088160
61	4	2	4	0.063365
62	4	2	5	0.048068
63	4	2	6	0.037854
64	4	2	7	0.030824
65	5	1	0	0.532389
66	5	1	1	0.253178
67	5	1	2	0.148773
68	5	1	3	0.097860
69	5	1	4	0.069267
70	5	1	5	0.051894
71	5	1	6	0.040290
72	5	1	7	0.032314
73	5	2	0	0.421035
74	5	2	1	0.214139
75	5	2	2	0.130491
76	5	2	3	0.087936
77	5	2	4	0.063754
78	5	2	5	0.048058
79	5	2	6	0.037845
80	5	2	7	0.030817
81	5	3	0	0.319189
82	5	3	1	0.174836
83	5	3	2	0.110431
84	5	3	3	0.076749
85	5	3	4	0.056915
86	5	3	5	0.044598
87	5	3	6	0.036856
88	5	3	7	0.031967
89	6	1	0	0.532196
90	6	1	1	0.253139
91	6	1	2	0.148751

92	6	1	3	0.097845
93	6	1	4	0.069256
94	6	1	5	0.051900
95	6	1	6	0.040295
96	6	1	7	0.032318
97	6	2	0	0.420981
98	6	2	1	0.214111
99	6	2	2	0.130474
100	6	2	3	0.087925
101	6	2	4	0.063443
102	6	2	5	0.048052
103	6	2	6	0.037841
104	6	2	7	0.030813
105	7	1	0	0.532149
106	7	1	1	0.253117
107	7	1	2	0.148738
108	7	1	3	0.097836
109	7	1	4	0.069250
110	7	1	5	0.051896
111	7	1	6	0.040291
112	7	1	7	0.032315
113	7	2	0	0.421022
114	7	2	1	0.214090
115	7	2	2	0.130461
116	7	2	3	0.087916
117	7	2	4	0.063410
118	7	2	5	0.048052
119	7	2	6	0.037841
120	7	2	7	0.030813
121	7	3	0	0.319137
122	7	3	1	0.174807
123	7	3	2	0.110413
124	7	3	3	0.076737
125	7	3	4	0.056905
126	7	3	5	0.044591
127	7	3	6	0.036849
128	7	3	7	0.031961

Статический анализ спектра

Обычно за основу описания статистики спектра берут описание спектра сложных ядер. Пусть s - расстояние между двумя соседними уровнями, а $p(s)ds$ - вероятность нахождения уровней в интервале между s и $s+ds$.

Полностью хаотическая система описывается распределением Вигнера:

$$p(s)=\frac{\pi}{2}s\exp\left(-\frac{\pi}{4}s^2\right), \qquad (4)$$

в то время как распределение Пуассона

$$p(s)=\exp(-s) \qquad (5)$$

характеризует интегрируемую систему.

Плотность вероятности обнаружить уровень в длине интервала s зададим так:

$$r(s)=As^{\nu}\ , \qquad (6)$$

где A – нормировочная константа, а ν – некоторый параметр.

Обобщением распределений Вигнера и Пуассона является распределение Броди:

$$p(s)=(\nu+1)a_\nu s^\nu \exp\left(-a_\nu s^{\nu+1}\right) \qquad (7)$$

где $a_\nu=\left[\Gamma\left(\frac{\nu+2}{\nu+1}\right)\right]^{\nu+1}$.

Как видно, при $\nu=1$ оно сводится к распределению Вигнера, а при $\nu=0$ к распределению Пуассона. Параметр ν выступает здесь в качестве меры хаотичности системы.

Далее следует подвергнуть энергетический спектр, полученный в рамках описанного выше адиабатического приближения и представленный в таблице №1, статической обработке с целью нахождения меры хаотичности системы- параметра Броди. Он оказывается равным 0, что свидетельствует о близости данного распределения к пуассоновскому, и о несущественном характере хаотичности данной системы.

Литература

1. A. Knauf, Ya.G.Sinai, Classical nonintegrability, quantum chaos (Birkhauser, Basel, 1997).
2. B.V.Chirikov, F.M.Izrailev, D.L.Shepelyansky, Z.Phys. D. 33, 77 (1988).
3. J.Bellissard, Non commutative methods in semiclassical analysis. Transition to chaos in classical and quantum mechanics (Springer, Berlin, 1991).
4. Л.Д.Пустыльников, Матем. сб. 194, 107 (2003)..
5. L.D.Pustyl'nikov, The proof of quantum chaos conjecture, the distribution of distances between adjacent fractional parts of polynomial values, and generalized continued fractions. BiBoS - Preprint 01-06-040, (Univ. Bielefeld, Bielefeld,2001).
6. Г.М. Заславский, УФН 129, 211 (1979).
7. П.В. Елютин, УФН, 155, 398 (1988).
8. Х-Й. Штокман, Квантовый хаос (Наука, Москва. 2003).
9. M.C.Gutzwiller , Chaos in Classical and Quantum Mechanics (Pergamon Press, New York, 1990).
10. A.-T.Le, T.Morishita, X-M.Tong, C.D.Lin, Phys.Rev.A 72, 032511 (2005).
11. S.I.Nikitin, V.N.Ostrovsky , J. Phys. B 18, 4349 (1985).

He DOUBLE-EXCITED STATES CHAOTICAL ANALYSIS AND BRODY PARAMETER CALCULATION

A.A.Kiselyov, I.Yu.Yurova

St. Petersburg State University, Institute of Physics, Ulyanovskaya str.1,
Peterhof, St-Petersburg, 198504, Russia
e-mail: antkiselyov@rambler.ru, inna.yurova@IJ15700.spb.edu

He atom is considered as a non-integrable (i.e. chaotical) system from the quantum-mechanical point of view. An approximate Schrodinger equation solution for the He atom is described: the exact rotative variables separation and the approximate radial variables separation (hyperspherical coordinates are taken here) which turns out to be possible due to their hierarchy existence. Statistical analysis is applied to the doubly excited states spectrum received. In the frame of this method the Brody parameter being the chaos measure is calculated.