Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Н. Лихачев, Т. Ю. Астахова, Г. А. Виноградов, Точное решение нерезонансной модели Цванцига и “квантовый хаос”, *ТМФ*, 2014, том 180, номер 3, 382–393

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8593>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.82.47.9

26 апреля 2023 г., 12:01:18

© 2014 г. В. Н. Лихачев*, Т. Ю. Астахова*, Г. А. Виноградов*

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ НЕРЕЗОНАНСНОЙ МОДЕЛИ ЦВАНЦИГА И “КВАНТОВЫЙ ХАОС”

Рассмотрена квантовая динамика модели Цванцига в случае отсутствия резонанса примесного узла с резервуаром. Получены аналитические выражения для эволюции заселенности примесного узла при различных начальных условиях. Продемонстрировано отличное согласие с численным расчетом. Проанализирована возможность существования квантового хаоса в рассматриваемой модели.

Ключевые слова: модель Цванцига, квантовая динамика, квантовый хаос.

DOI: 10.4213/tmf8593

1. ВВЕДЕНИЕ

Модель Цванцига [1] является одной из простейших моделей, позволяющей моделировать и анализировать перенос энергии и заряда в молекулярных и биологических системах. Недавно была опубликована серия статей Бендерского с коллегами [2]–[4], в которых эта модель была подробно рассмотрена. Одним из принципиальных выводов, сделанных в этих работах, было заключение о возможности существования на больших временах квантового хаоса. В дополнение к подробному анализу соответствия модели Цванцига реальным экспериментам, проведенному в [2]–[4], можно добавить экспериментальные результаты по переносу заряда в биологических системах [5]–[8] (см. также обзоры [9], [10]), для объяснения которых модель Цванцига может оказаться полезной.

Работа организована следующим образом. В разделе 2 получено аналитическое решение модели Цванцига в нерезонансном случае. Также получено решение этой модели для произвольных начальных условий. В разделе 3 приведен алгоритм численного решения задачи и проведено сравнение его с аналитическими результатами. В разделе 4 обсуждается вопрос о возможности существования квантового хаоса в рассматриваемой модели. Поскольку точные критерии хаотичности квантовой консервативной системы пока не сформулированы, рассмотрение этого вопроса проведено с помощью известных качественных критериев.

*Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН, Москва, Россия.
E-mail: gvin@deom.chph.ras.ru

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ

Рассматривается обобщение решеточной модели Цванцига [1] на нерезонансный случай. Модель описывает систему, состоящую из “резервуара” с эквидистантным спектром энергий и одного примесного узла. Примесный узел одинаково взаимодействует со всеми узлами резервуара, а узлы резервуара между собой не взаимодействуют.

Амплитуду волновой функции на примесном узле обозначим через $a(t)$, а амплитуды на узлах резервуара будем обозначать через $b_k(t)$. Энергия k -го узла $\varepsilon_k = k$, $-\infty < k < \infty$. Через E обозначим энергию на примесном узле, через C – энергию взаимодействия примесного узла со всеми узлами резервуара. Сначала решим нестационарную задачу, когда в начальный момент времени возбуждение находится на примесном узле и вычисляется эволюция заселенности этого узла. В работе [2] было получено аналитическое решение этой задачи для случая $E = 0$, когда примесный узел находится в резонансе с узлом b_0 . Мы рассмотрим более общий случай, когда энергия E примесного узла произвольна и резонанс отсутствует.

Во вторичном квантовании гамильтониан записывается следующим образом:

$$H = Ea^+a^- + \sum_{k=-\infty}^{\infty} kb_k^+b_k^- + C \sum_{k=-\infty}^{\infty} (a^+b_k^- + b_k^+a^-). \quad (1)$$

Уравнение Шредингера для волновой функции $\Psi = \{\dots, b_{-2}, b_{-1}, a, b_0, b_1, b_2, \dots\}$ имеет вид

$$i\dot{a}(t) = Ea(t) + C \sum_{k=-\infty}^{\infty} b_k(t), \quad (2)$$

$$i\dot{b}_k(t) = kb_k(t) + Ca(t), \quad -\infty < k < \infty,$$

с начальными условиями $a(t)|_{t=0} = 1$, $b_k(t)|_{t=0} = 0$, что соответствует тому, что в начальный момент возбуждение (для определенности – электрон) находится на примесном узле.

Решение задачи Коши (2) для амплитуды $a(t)$ удобнее всего получить, сделав преобразование Лапласа. Тогда система уравнений (2) превращается в алгебраическую систему

$$i[pa(p) - 1] = Ea + C \sum_{k=-\infty}^{\infty} b_k(p), \quad (3)$$

$$ipb_k(p) = kb_k(p) + Ca(p), \quad -\infty < k < \infty,$$

Из второго уравнения в (3) $b_k(p)$ явно выражается через $a(p)$:

$$b_k(p) = -\frac{Ca(p)}{k - ip}. \quad (4)$$

Это выражение для $b_k(p)$ подставим в уравнение для $a(p)$ (первое из уравнений (3)). Полученная сумма по $b_k(p)$ есть не что иное, как разложение функции cth на простые дроби:

$$\sum \frac{1}{k - ip} = i\pi \text{cth } \pi p. \quad (5)$$

Тогда для $a(p)$ получаем следующее выражение:

$$a(p) = \frac{1}{p + iE + \pi C^2 \text{cth } \pi p}. \quad (6)$$

Удобно представить это выражение в виде разложения по степеням $e^{-2\pi p}$:

$$a(p) = \frac{1 - e^{-2\pi p}}{p + iE + \pi C^2} \frac{1}{1 - qe^{-\pi p}}, \quad q \equiv \frac{\pi + iE - \pi C^2}{\pi + iE + \pi C^2}. \quad (7)$$

Разлагая дробь $(1 - qe^{-2\pi p})^{-1}$ по степеням $e^{-2\pi p}$, получаем представление амплитуды $a(p)$ в виде следующего ряда:

$$a(p) = \frac{1}{p + iE + \pi C^2} - 2\pi C^2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-2\pi pm} (p + iE - \pi C^2)^{m-1}}{(p + iE + \pi C^2)^{m+1}}. \quad (8)$$

Амплитуда $a(t)$ есть обратное преобразование Лапласа выражения (8). Тогда первое слагаемое ряда (8) дает следующее выражение для амплитуды $a_0(t)$:

$$a_0(t) = e^{-\pi C^2 t - iEt}. \quad (9)$$

Это выражение описывает амплитуду $a(t)$ в области $[0 < t < 2\pi]$, при этом последующие слагаемые отличны от нуля только при $t > 2\pi m$ (из-за множителя $e^{-2\pi pm}$). Вклад m -го слагаемого (m -й парциальной амплитуды) в полную амплитуду дается вычетом в полюсе $(m+1)$ -го порядка в точке $p = -\pi C^2 - iE$:

$$a_m(t) = -\frac{t_m}{m} e^{-t_m/2 - iE(t-2\pi m)} L_{m-1}^1(t_m) \theta(t_m), \quad (10)$$

где L_m^1 – обобщенный полином Лагерра [11], θ – тета-функция, t_m – локальное время для m -й парциальной амплитуды, $t_m \equiv \pi C^2(t - 2\pi m)$.

При $E = 0$ выражения (9) и (10) совпадают с полученными в работе [2]. При $E \neq 0$ отличие состоит в дополнительном фазовом множителе – своем для каждой из парциальных амплитуд $a_m(t)$.

Отметим, что на первом временном интервале ($0 < t < 2\pi$) амплитуда $a(t)$ отличается от случая $E = 0$ лишь фазовым множителем e^{-iEt} , хотя при $E = 0$ уровень находится в резонансе с уровнем b_0 . Также отметим, что если E – целое число, то ответ с точностью до общего множителя e^{-iEt} такой же, как и при $E = 0$. Это объясняется тем, что в случае целочисленного E в исходной задаче можно отсчитывать все энергии от E и задача сводится к исходной модели Цванцига с $E = 0$.

Используя соотношение

$$\frac{dL_n^1}{dx} = \frac{1}{x} [nL_n^1 - (n+1)L_{n-1}^1],$$

получаем следующее выражение для производных парциальных амплитуд:

$$\begin{aligned} \frac{da_m(t)}{dt} &= e^{-t_m/2 - iE(t-2\pi m)} \times \\ &\times \left\{ L_{m-1}^1(t_m) \left[\frac{t_m}{m} (\pi C^2 + iE) + 2\pi C^2 \right] + 2\pi C^2 L_{m-2}^1(t_m) \right\} \theta(t_m). \end{aligned} \quad (11)$$

Это выражение понадобится ниже для построения фазовых траекторий.

Теперь обобщим задачу на случай произвольных начальных условий. Исходная система уравнений (2) является линейной и однородной. Поэтому достаточно получить решение для начального условия $b_{k_0}(t)|_{t=0} = 1$ с произвольным индексом

узла k_0 . Решение для произвольных начальных условий является суперпозицией полученного выше решения (с условием $a(t)|_{t=0} = 1$) и решений с начальным условием $b_{k_0}(t)|_{t=0} = 1$.

Применяя к системе (2) преобразование Лапласа и действуя, как и ранее, получаем следующее выражение для лаплас-образа амплитуды $a(p)$ в виде суммы парциальных амплитуд:

$$a(p) = a_0(p) + a_1(p) + a_2(p) + \dots, \quad (12)$$

где

$$a_0(p) = \frac{iC}{(p + ik_0)(p + iE + \pi C^2)},$$

$$a_m(p) = \frac{2\pi i C^3}{p + ik_0} \frac{e^{-2\pi p m} (p + iE - \pi C^2)^{m-1}}{(p + iE + \pi C^2)^{m+1}}, \quad m = 1, 2, \dots$$

Обратное преобразование Лапласа дает зависимость амплитуды от времени. Необходимые интегралы легко вычисляются с помощью вычетов в простом полюсе $p = -ik_0$ и полюсе $(m + 1)$ -го порядка в точке $p = -iE - \pi C^2$. Простой полюс $-ik_0$ дает осциллирующее слагаемое, а второй полюс дает экспоненциально убывающий вклад. Получаем следующий ответ:

$$a_0(t) = \frac{iC}{ik_0 - iE - \pi C^2} [e^{-ik_0 t} - e^{-\pi C^2 t - iEt}],$$

$$a_m(t) = 2\pi i C^3 \frac{[i(k_0 - E) + \pi C^2]^{m-1}}{[i(k_0 - E) - \pi C^2]^{m+1}} e^{-ik_0 t} -$$

$$- \frac{iCZ}{2\pi C^2} e^{-t_m/2 - iE(t - 2\pi m)} \sum_{j=0}^m L_{m-j}^{j-1}(t_m) Z^j \theta(t_m), \quad (13)$$

где

$$Z \equiv \frac{2\pi C^2}{ik_0 - iE - \pi C^2}.$$

3. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ

Численно решать уравнения (2) удобно, если выписать уравнение только для функции $a(t)$. Для этого в уравнениях (2) нужно выразить $b_k(t)$ через $a(t)$:

$$b_k(t) = -iC e^{-ikt} \int_0^t e^{-ik\tau} a(\tau) d\tau. \quad (14)$$

Подставляя это выражение в уравнение для $a(t)$ (см. (2)), используя известное соотношение для δ -функции $\sum_k e^{ikt} = 2\pi \sum_m \delta(t - 2\pi m)$, получаем следующее уравнение для $a(t)$:

$$\dot{a}(t) = -iEa(t) - \pi C^2 [a(t) + 2a(t - 2\pi)\theta(t - 2\pi) + 2a(t - 4\pi)\theta(t - 4\pi) + \dots]. \quad (15)$$

Сначала рассмотрим решение первой задачи, когда начальное условие имеет вид $a(t)|_{t=0} = 1$. Для ее решения вместо одной функции $a(t)$ введем набор функций

Рис. 1. Амплитуда $a(t)$ в интервале $30 \leq t/2\pi < 31$ ($C = 1$, $E = 0.3$, $b_k = 0$). Сплошная линия – $\text{Re}\{a(t)\}$, штриховая линия – $\text{Im}\{a(t)\}$ (численное решение уравнений (15)). Кружки – аналитическое решение (9)–(10).

$a_0(t), a_1(t), a_2(t), \dots$, удовлетворяющих следующей системе уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{a}_0(t) &= -(iE + \pi C^2)a_0(t), \\ \dot{a}_1(t) &= -(iE + \pi C^2)a_1(t) - 2\pi C^2 a_0(t), \\ \dot{a}_2(t) &= -(iE + \pi C^2)a_2(t) - 2\pi C^2(a_0(t) + a_1(t)), \\ &\dots, \\ \dot{a}_n(t) &= -(iE + \pi C^2)a_n(t) - 2\pi C^2(a_0(t) + a_1(t) + \dots + a_{n-1}(t)). \end{aligned} \quad (16)$$

Эти уравнения нужно решать на последовательных временных интервалах длиной 2π каждый. А именно на первом интервале $[0, 2\pi]$ решается только первое уравнение с начальным условием $a_0(t)|_{t=0} = 1$. На этом интервале полная амплитуда $a(t)$ и есть $a_0(t)$. На втором интервале $[2\pi, 4\pi]$ решаются два уравнения (для $a_0(t)$ и $a_1(t)$) с начальными условиями $a_1(2\pi) = a_0(2\pi)$, $a_0(2\pi) = 1$. На этом интервале амплитуда $a_1(t)$ как раз и есть $a(t)$. Далее аналогично: после прохождения очередного n -го интервала появляется еще одна функция $a_n(t)$ и задаются следующие начальные условия: $a_m(2\pi n) = a_{m-1}(2\pi n)$ и $a_0(2\pi n) = 1$ для $n \geq m$. Тогда на $(n+1)$ -м интервале амплитуда $a(t)$ опять есть $a_n(t)$. Сравнение численного и точного результатов показано на рис. 1. Вычисления проводились методом Рунге–Кутты 4-го порядка. Совпадение результатов очень хорошее: различие $\sim 10^{-11}$.

Теперь рассмотрим другое начальное условие: $b_{k_0}(0) = 1$. В этом случае вместо однородного уравнения (14) получаем следующее неоднородное уравнение:

$$\dot{a}(t) = -iCe^{-ik_0 t} - iEa_0(t) - \pi C^2[a_0(t) + 2a(t - 2\pi)\theta(t - 2\pi) + \dots]. \quad (17)$$

Это уравнение эквивалентно следующей системе уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{a}_0(t) &= -(iE + \pi C^2)a_0(t) - iCe^{-ik_0 t}, \\ \dot{a}_1(t) &= -(iE + \pi C^2)a_1(t) - 2\pi C^2 a_0(t) - iCe^{-ik_0 t}, \\ \dot{a}_2(t) &= -(iE + \pi C^2)a_2(t) - 2\pi C^2[a_0(t) + a_1(t)] - iCe^{-ik_0 t}, \\ &\dots, \\ \dot{a}_n(t) &= -(iE + \pi C^2)a_n(t) - 2\pi C^2[a_0(t) + a_1(t) + \dots + a_{n-1}(t)] - iCe^{-ik_0 t}. \end{aligned} \quad (18)$$

Рис. 2. Амплитуда $a(t)$ в интервале $30 \leq t/2\pi < 31$ ($C = 1$, $E = 0.3$, $b(5) = 1$ ($k_0 = 5$)). Сплошная линия – $\text{Re}\{a(t)\}$, штриховая линия – $\text{Im}\{a(t)\}$ (численное решение уравнений (15)). Кружки – аналитическое решение (9)–(10).

Как и ранее, система решается на интервалах длиной 2π каждый. На первом интервале решается одно уравнение для $a_0(t)$ с начальным условием $a_0(t)|_{t=0} = 0$. После прохождения очередного n -го интервала появляется еще одна функция $a_n(t)$ и задаются начальные условия $a_m(2\pi n) = a_{m-1}(2\pi n)$ и $a_0(2\pi n) = 0$ для $n \geq m$. Расхождение численного результата с точным также составляет $\sim 10^{-11}$ (см. рис. 2).

Заметим, что если в начале задана суперпозиция $b_k(0)$, то в качестве неоднородности в правой части системы (17) вместо экспоненты надо поставить следующую периодическую функцию: $\phi(t) = -iC \sum_k b_k(t)|_{t=0} e^{-ikt}$. Предложенный нами метод численного интегрирования очень хорошо воспроизводит аналитический ответ, и на больших временах он получается даже быстрее, чем дают вычисления по аналитическим формулам.

4. О ТАК НАЗЫВАЕМОМ “КВАНТОВОМ ХАОСЕ” В МОДЕЛИ ЦВАНЦИГА

В работе [2] приведены некоторые аргументы в пользу существования в рассматриваемой модели Цванцига квантового хаоса (см., например, [12]). В работе утверждается, что для не слишком малой константы взаимодействия C существует критическое время, начиная с которого поведение системы становится хаотическим. В пересчете на интервалы длиной 2π указано, что критическим значением номера интервала является $K_{\text{кр}} = \pi^2 C^2$. Если, например, $C = 1$, то получается, что в интервалах с номерами $k > 10$ решение хаотично. Однако аргументация авторов представляется нам не слишком убедительной, и ниже приведен ряд возражений. Рассматриваться будет только исследованный в работе [2] случай $E = 0$, когда амплитуда $a(t)$ вещественна.

В качестве иллюстрации хаотического поведения системы в работе [2] приведен рисунок временного поведения амплитуды $a(t)$ на интервале $0 < t/2\pi < 32$. Сначала амплитуда спадает экспоненциально, но на больших временах она меняется весьма нерегулярно. На рис. 3 приведен график $a(t)$ для $29 < t/2\pi < 31$. Здесь следует заметить, что в точках $t = 2\pi k$ (k – целое число) амплитуда $a(t)$ имеет особенность.

Рис. 3. Зависимость амплитуды $a(t)$ от времени на интервале $29 < t/2\pi < 31$ ($C = 1$, $E = 0$, $a(0) = 1$). На вставке показана производная da/dt в окрестности точки $t/2\pi = 30$.

Рис. 4. Фазовая траектория на интервале $20 < t/2\pi < 30$ ($C = 1$, $E = 0$, $a(0) = 1$).

По мнению авторов работы [2], столь нерегулярное поведение является свидетельством хаотического поведения системы. Однако существует простой критерий хаотичности, а именно проверка устойчивости решения по отношению к малому изменению начальных условий. Очевидно, что в рассматриваемой задаче амплитуда $a(t)$ устойчива. Действительно, пусть $\Delta\Psi$ – начальное отклонение. В силу эрмитовости гамильтониана норма отклонения решения со временем остается постоянной. Следовательно, отклонение любой компоненты волновой функции (в нашем случае это $a(t)$) конечно и мало, если мало начальное отклонение.

В качестве другой иллюстрации хаотического поведения системы в работе [2] приведен график фазовой траектории $\{\dot{a}(t), a(t)\}$ для интервала $t/2\pi < 31$. (Заметим, что в подписи к рис. 2 из работы [2] время указано ошибочно, а именно там указано $[t/2\pi] = 30$). На рис. 4 приведена часть траектории, показанной в [2].

В общем случае верно утверждение, что если гамильтониан является ограниченным оператором, то и производная волновой функции устойчива по отношению к начальному возмущению. Поэтому рассмотрим вопрос об устойчивости производной da/dt . Итак, пусть $\Delta\Psi$ – начальное отклонение. Для консервативной системы

производная $d(\Delta\Psi)/dt$ удовлетворяет уравнению Шредингера. Так как гамильтониан ограничен, то начальное значение производной имеет конечную норму, которая и будет со временем сохраняться. Следовательно, будет ограниченным и отклонение производной любой компоненты волновой функции. Поэтому для ограниченных гамильтонианов любая фазовая траектория $\{\Psi_i, \Psi_j^*\}$ является устойчивой по отношению к изменению начальных условий. Отметим, что для неограниченных гамильтонианов, вообще говоря, возможна ситуация, когда производная неограниченно возрастает (например, из-за вклада все более осциллирующих слагаемых).

Для начального отклонения $\Delta\Psi = \{\Delta a; \{\Delta b_k\}\}$ начальное значение производной равно $\Delta\Psi(0) = \{-iC \sum_k \Delta b_k; \{-iC \Delta a - ikb_k\}\}$. Это значение производной может иметь, вообще говоря, бесконечную норму. И это позволяет предположить, что какая-либо компонента производной с течением времени может неограниченно возрасть. В приложении проведено исследование вопроса об устойчивости производной da/dt по отношению к изменению начальных условий. Отметим, что сама постановка задачи об устойчивости производной волновой функции применительно к выяснению вопроса о хаотичности квантовых систем нам кажется весьма интересной и полезной.

По мнению авторов работы [2], по мере увеличения времени в формировании амплитуды участвуют все более осциллирующие функции, что в конце концов приводит к хаотизации. Можно переформулировать постановку задачи следующим образом: какое количество осцилляций надо учесть для достижения приемлемой точности, если задаться определенным интервалом времени? Рассмотрим исходную (бесконечную) систему уравнений (2) для случая $E = 0$, $a(0) = 1$. Решать ее тем или иным способом можно только в случае ограниченного числа состояний. Будем учитывать только состояния резервуара с номерами $|k| < K_{\max}$, т.е. полное число состояний равно $2K_{\max} + 2$. Задачу можно решать двумя способами: или диагонализацией усеченного гамильтониана с нахождением амплитуды $a(t)$ в виде разложения по собственным функциям, или численно решать задачу Коши для усеченной системы уравнений (2). При численном решении возникает трудность, связанная с выбором шага интегрирования. Действительно, “последнее” уравнение $i\dot{b}_{K_{\max}} = K_{\max} b_{K_{\max}} + Ca$ показывает, что шаг интегрирования Δt нужно выбирать очень маленьким: $\Delta t \ll 1/K_{\max}$. Было построено решение усеченной системы (2) для интервала $[t/2\pi] = 30$ и проведено сравнение с точным решением (см. рис. 5).

Также для $K_{\max} = 1000$ было получено решение с помощью разложения по собственным функциям усеченного гамильтониана (отличие от численного решения задачи Коши незначительно). Анализ решений, приведенных на рис. 5, показал, что отклонение решений усеченных уравнений от точного составляет $\sim 10/K_{\max}$. Таким образом, вклад быстро осциллирующих состояний (с частотой больше $K_{\max}$) мал и не приводит к каким-либо неожиданным отклонениям. Затруднение, с которым пришлось столкнуться при интегрировании системы, состоит в том, что чем больше состояний желательно учесть, тем меньший временной шаг интегрирования приходится выбирать.

И с этим обстоятельством приходится сталкиваться всякий раз, когда решается любая линейная бесконечная система с неограниченным спектром. Однако эти затруднения носят чисто методический характер, они не указывают на какую-либо хаотичность.

Рис. 5. Точное решение для амплитуды $a(t)$ на интервале $[t/2\pi] = 30$ (а); отклонения численного решения от точного решения для разных значений $K_{\max}$: $K_{\max} = 1000, 3000, 9000$ для пунктирной, штриховой и штрихпунктирной кривых соответственно (б).

Еще одним из принятых подходов к вопросу о квантовом хаосе является рассмотрение спектра гамильтониана и собственных функций. В рассматриваемой задаче уравнение на собственные значения имеет вид

$$\varepsilon = \pi C^2 \operatorname{ctg} \pi \varepsilon, \quad (19)$$

и энергии ε_n являются нечетными функциями номера n , для $n \gg 1$ они определяются во формуле

$$\varepsilon_{n+1} = n + \frac{C^2}{n} - \frac{C^4}{n^3} \left(1 + \frac{\pi^2 C^2}{3} \right) + O\left(\frac{1}{n^5}\right). \quad (20)$$

Обычно в задачах, связанных с проблемой квантового хаоса, спектр является в некотором смысле хаотическим. То же самое относится и к расстояниям между соседними уровнями энергии (см., например, [13]–[16]). В рассматриваемой задаче спектр регулярен и расстояния между уровнями монотонно убывают. В соответствии с общепринятой точкой зрения можно утверждать, что такое поведение спектра является еще одним свидетельством отсутствия квантового хаоса в рассматриваемой задаче.

Для дополнительного подтверждения отсутствия квантового хаоса найдем собственные функции гамильтониана. Их удобно брать в x -представлении, т. е. записывать их не в виде вектора $\{b_k\}$, а в виде функции $b(x)$, получаемой из ряда Фурье:

$$b(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{k=-\infty}^{\infty} b_k e^{-ikx}, \quad 0 < x < 2\pi. \quad (21)$$

Собственная функция, отвечающая энергии ε , имеет вид

$$\Psi^\varepsilon \equiv \{a^\varepsilon; b^\varepsilon\} = \frac{1}{\sqrt{\pi^2 C^2 + \sin^2 \pi \varepsilon}} \left\{ \sin \pi \varepsilon; C \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{i\varepsilon(\pi-x)} \right\}. \quad (22)$$

Во многих работах, посвященных проблеме квантового хаоса, исследуемым объектом являются как раз собственные функции высоковозбужденных состояний. И обычно для хаотических систем они оказываются весьма нерегулярными (см.,

например, [17]–[20]), что позволяет использовать для их описания статистические методы. В нашем случае волновые функции $b^\varepsilon(x)$ представляют собой плоские волны, что никак не демонстрирует какой-либо нерегулярности.

В заключение заметим, что практически все системы, обладающие квантовым хаосом, имеют классический предел, в котором также обнаруживается хаотическое поведение. В рассматриваемой задаче совершенно неясно, как можно было бы осуществить переход к классическому пределу. И это, на наш взгляд, есть дополнительное свидетельство отсутствия квантового хаоса.

Мы полагаем, что, несмотря на проведенный анализ, вопрос существования в модели Цванцига квантового хаоса требует все же дальнейшего изучения.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Рассмотрим вопрос об устойчивости производной da/dt по отношению к изменению начальных условий. Пусть $\Psi(0) = \{a_0, b_0(x)\}$ и $\Psi(t) = \{a(t), b(x, t)\}$. Так как задача линейная, то нужно лишь показать равномерную ограниченность производной da/dt . Выражение для этой производной удобно получить в виде разложения по собственным функциям. Решение $\Psi(t)$ записывается в виде ряда:

$$\begin{aligned}\Psi(t) \equiv \{a(t); b(x+t)\} &= \sum_{\varepsilon} d^{\varepsilon} e^{-i\varepsilon t} \left\{ \sin \pi \varepsilon; C \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{i\varepsilon(\pi-x)} \right\}, \\ d^{\varepsilon} &= \frac{1}{\pi^2 C^2 + \sin^2(\pi \varepsilon)} \left[a_0 \sin \pi \varepsilon + C \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-i\varepsilon \pi} b^{\varepsilon} \right], \\ b^{\varepsilon} &\equiv \int_0^{2\pi} b_0 e^{-i\varepsilon x} dx.\end{aligned}\quad (23)$$

Как видно из этих выражений, функция $b(x, t)$, $0 < x < 2\pi$, зависит только от одного аргумента – суммы $(x+t)$. Таким образом, волновая функция $b(t)$ представляет собой суперпозицию плоских волн, имеющих одинаковую фазовую скорость $v = 1$.

Из исходного уравнения Шредингера (2) нетрудно получить соотношение, связывающее функцию $a(t)$ и ее производную с функцией $b(t)$:

$$\dot{a} + \pi C^2 a = -iC \sqrt{2\pi} b. \quad (24)$$

Поскольку амплитуда $a(t)$ ограничена, то для ограниченности производной da/dt нам нужно показать ограниченность функции $b(t)$.

В силу линейности задачи можно отдельно рассмотреть два случая.

СЛУЧАЙ 1. Пусть $b_0(x) = 0$ и $a_0 = 1$. Можно получить выражения и для амплитуды $a(t)$, и для функции $b(x, t)$, которая зависит только от суммы $u = x + t$:

$$\begin{aligned}a(t) &= 2 \sum_{\varepsilon > 0} \frac{\sin^2 \pi \varepsilon \cos \varepsilon t}{\pi^2 C^2 + \sin^2 \pi \varepsilon}, \\ b(u) &= iC \sqrt{2\pi} \sum_{\varepsilon > 0} \frac{\sin \pi \varepsilon \sin[\varepsilon(\pi - u)]}{\pi^2 C^2 + \sin^2 \pi \varepsilon}.\end{aligned}\quad (25)$$

Эти выражения были использованы для численного вычисления функций $a(t)$ и $b(u)$. Взяв 10^6 собственных значений (решений уравнения (19)), мы сравнили $a(t)$ с аналитическим выражением (10). Совпадение ответов составило $\sim 10^{-9}$, но в точках

Рис. 6. Кружки – функция $b(t)$, вычисленная согласно (25) с учетом 10^6 собственных значений. Сплошная линия – функция b^ε , вычисленная по формуле (23).

$u = 2\pi k$ точность несколько хуже ($\sim 10^{-5}$). На рис. 6 проведено сравнение функции $b(t)$ с левой частью соотношения (24).

Отметим, что $b(u) = 0$ для $0 < u < 2\pi$, что соответствует начальному условию $b_0(x) = 0$. Также отметим, что функция $b(u)$ разрывна в точках $u = 2\pi k$ и принимает в этих точках среднее значение (как в случае рядов Фурье).

Мы предполагаем, что функция $b(u)$, задаваемая рядом (25), ограничена. Эта ограниченность была проверена численно для $u \leq 10^3$. При этом не наблюдалось никакого появления хаотичности, предполагаемой в работе [2] при $u > 20\pi$.

СЛУЧАЙ 2. Пусть $a_0 = 0$ и $b(t)|_{t=0} = b_0(x)$. Рассмотрим простейший случай в k -представлении, когда сначала есть только одна компонента: $b_k(t)|_{(t=0)} = \delta_{k,k_0}$. Тогда (см. (23)) $b^\varepsilon \sim \sin \pi \varepsilon (\varepsilon - k_0)^{-1}$, и ряд для $b(u)$ очевидным образом ограничен. Если в начальном векторе отлично от нуля конечное число компонент, то и в этом случае $b(u)$ – ограниченная функция. В общем случае, когда задана начальная функция $b_0(x)$, для ограниченности $b(u)$ достаточно, чтобы b^ε убывало быстрее, чем $1/\varepsilon$.

Благодарности. Авторы признательны рецензенту за полезные замечания, относящиеся к вопросу о квантовом хаосе.

Список литературы

- [1] R. Zwanzig, *Lect. Theor. Phys.*, **3** (1960), 106–141.
- [2] Н. А. Виглин, В. В. Устинов, В. В. Осипов, *Письма в ЖЭТФ*, **86:3** (2007), 221–225.
- [3] В. А. Бендерский, Л. Н. Гак, Е. И. Кац, *ЖЭТФ*, **135:1** (2009), 176–193.
- [4] В. А. Бендерский, Л. Н. Гак, Е. И. Кац, *ЖЭТФ*, **136:3** (2009), 589–600.
- [5] K. E. Augustyn, J. C. Genereux, J. K. Barton, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **46:30** (2007), 5731–5733.
- [6] J. K. Barton, E. D. Olmon, P. A. Sontz, *Coord. Chem. Rev.*, **255:7–8** (2011), 619–634.
- [7] S. S. Mallajosyula, S. K. Pati, *J. Phys. Chem. Lett.*, **1:12** (2010), 1881–1894.
- [8] B. Giese, *Annu. Rev. Biochem.*, **71** (2002), 51–70.

- [9] J. C. Genereux, J. K. Barton, *Chem. Rev.*, **110**:3 (2010), 1642–1682.
- [10] Т. Ю. Астахова, В. Н. Лихачев, Г. А. Виноградов, *Успехи химии*, **81**:11 (2012), 994–1010.
- [11] И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Физматгиз, М., 1963.
- [12] Г. М. Заславский, Р. З. Сагдеев, *Введение в нелинейную физику. От маятника до турбулентности и хаоса*, Наука, М., 1988.
- [13] F. M. Izrailev, *Phys. Rep.*, **196**:5–6 (1990), 299–392.
- [14] Ya. G. Sinai, *Phys. A*, **163**:1 (1990), 197–204.
- [15] П. В. Елютин, *УФН*, **155**:3 (1988), 397–442.
- [16] J. Ford, M. Ilg, *Phys. Rev. A*, **45**:9 (1992), 6165–6173.
- [17] J. P. Keating, M. Novaes, S. D. Prado, M. Sieber, *Phys. Rev. Lett.*, **97**:15 (2006), 150406, 4 pp.
- [18] W. E. Bies, E. J. Heller, *J. Phys. A*, **35**:27 (2002), 5673–5685.
- [19] A. Backer, R. Schubert, *J. Phys. A*, **35**:3 (2002), 539–564.
- [20] Ф. Штайнер, *Нелинейная динам.*, **2**:2 (2006), 214–235.

Поступила в редакцию 6.09.2013,
после доработки 31.03.2014