

**УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК**

530.145

**КВАНТОВЫЙ ХАОС ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ  
МНОГОУРОВНЕВЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ  
С ПОЛЕМ КОГЕРЕНТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ***Г.П. Берман, А.Р. Коловский*

(Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск)

Введение . . . . .	95
1. Изолированный нелинейный резонанс . . . . .	97
1.1. Классический нелинейный резонанс. 1.2. Примеры изолированного нелинейного резонанса в различных системах. 1.3. Квантовый нелинейный резонанс (КНР). 1.4. Времена соответствия классической и квантовой динамики. 1.5. Спектральные свойства нелинейного резонанса. 1.6. Квантовомеханическое представление действие—угол. 1.7. КНР в системах, не имеющих классического аналога. 1.8. КНР и ориентация молекул ИК полем.	
2. Взаимодействие двух нелинейных резонансов . . . . .	111
2.1. Возникновение хаоса при взаимодействии двух классических нелинейных резонансов. 2.2. Динамика классических средних. 2.3. Взаимодействие КНР. 2.4. Структура КФ. Хаотическая делокализация. 2.5. Структура КФ. Двумерная делокализация. 2.6. Спектр наведенной поляризации. 2.7. Времена соответствия. 2.8. Дипольная молекула в СВЧ поле. 2.9. Двухатомная молекула под действием ИК поля. 2.10. "Вращающаяся" двухуровневая система.	
Заключение . . . . .	133
Приложения . . . . .	135
I, II, III: Учет процессов релаксации	
Список литературы . . . . .	141

**Введение**

Прежде чем перейти к содержательной части работы, мы посчитали необходимым с самого начала указать круг вопросов, которые будут рассмотрены в данной статье. Это тем более необходимо, что в названии статьи содержится сочетание слов "квантовый" и "хаос", которое сегодня может быть истолковано весьма широко. Действительно, к настоящему времени теория квантового хаоса объединяет очень много различных проблем, на первый взгляд мало связанных друг с другом. Это и поиски формального критерия квантового хаоса и его связи с характеристиками классического хаоса, исследование структуры и статистических свойств энергетического спектра систем с разрушенными интегралами движения, сравнение квантовомеханического и классического описаний динамики неавтономных систем, теория рассеяния на сложных объектах и многое другое. (Краткий обзор некоторых основных вопросов, входящих в группу вопросов квантового хаоса, вместе с широким подбором библиографии содержится в недавнем обзоре [1]). Исходным объединяющим элементом всех направлений является выбор систем, которые проявляют в той или иной степени хаотическую динамику при классическом

подходе, во-первых; во-вторых, анализ проводится в квазиклассической области параметров. Заметим, что хаотический режим движения может проявлять подавляющее большинство классических динамических систем. Поэтому не будет ошибкой, если мы дадим определение теории квантового хаоса как направления современной физики, исследующего квантовые системы в квазиклассической области параметров.

На начальной стадии становления теории квантового хаоса основным аспектом работ был чисто теоретический вопрос: что такое хаос в квантовых системах? (В более общей формулировке, это вопрос о связи классической и квантовой механики. Этот вопрос не потерял свою актуальность и по настоящий день.) Однако с течением времени, когда было достигнуто понимание основных черт "хаоса" в квантовых системах (по крайней мере гамильтоновых), на первый план начал выходить прикладной аспект — что нового может принести теория квантового хаоса в традиционные области физики? Какие явления находят свое объяснение через вновь созданную теорию? Повышению интереса к прикладному аспекту в немалой степени содействуют и возросшие возможности экспериментальной физики, позволяющие исследовать квантовые объекты в области больших квантовых чисел и при высоких интенсивностях внешних полей.

Данную работу можно рассматривать как приложение теории квантового хаоса к вопросу о поведении квантового объекта под действием когерентного излучения. При этом постановка задачи выглядит не сложнее, чем постановка задачи о поведении двух- или трехуровневой системы под действием периодического возмущения: имеется система уровней и мы интересуемся динамикой населенностей уровней, поведением различных наблюдаемых величин (например, поляризации) к т.д. Однако отказ от конечноуровневого приближения (что является необходимым требованием при анализе системы в квазиклассической области параметров) дает возможность исследовать динамику более полно и обнаружить специфические режимы движения, которые, с одной стороны, аналогичны динамике классической системы, с другой стороны, в силу квантовой природы объекта имеют существенные отличия.

Обзор написан на основе работ авторов по указанной тематике за последнее десятилетие. При этом одной из наших целей была разработка по возможности универсального подхода к анализу систем в квазиклассической области параметров. Такой универсальный подход к анализу систем во внешнем периодическом поле существует в классической механике и состоит из трех основных этапов: это переход к переменным "действие—угол", выделение нелинейных резонансов системы с внешним полем и последующий учет влияния резонансов друг на друга. Очевидно, что при квантовом анализе рационально следовать этой схеме, и структура работы отражает ее. Заметим также, что в классической механике можно выделить два предельных случая: наличие в системе малого числа резонансов (в пределе всего двух) и большого в пределе бесконечного числа резонансов. Наряду с общими чертами эти два крайних случая имеют и существенные отличия. В частности, во втором имеет место явление диффузии, которое отсутствует в первом. Мы ограничились рассмотрением системы двух взаимодействующих резонансов и анализом квантовых объектов, где это явление имеет место. Квантовый анализ явления диффузии содержится в обзоре [2]. Забегая вперед, отметим, что эти два предельных случая сильно отличаются и при квантовом подходе.

При написании данной работы мы ставили во главу угла последовательность и целостность изложения. По этой причине мы постарались ограничиться

как можно меньшим числом ссылок, хотя это и повлекло за собой некоторое увеличение объема обзора. Мы адресуем обзор исследователям, работающим в области квантовой оптики и радиофизики. Поэтому нашей основной целью в данной работе является квантовый анализ конкретных физических объектов, а вопрос о соответствии классического и квантового описаний (как уже отмечалось выше, данный аспект обязательно присутствует в работах, посвященных квантовому хаосу) отнесен на второй план.

Пользуясь случаем, выражаем благодарность Г.М. Заславскому, совместно с которым было получено большое число результатов, изложенных в обзоре, Ф.М. Израйлеву, а также Б.В. Чирикову за постоянное внимание к работе, полезные обсуждения и критические замечания.

## 1. Изолированный нелинейный резонанс

**1.1. Классический нелинейный резонанс.** Понятие нелинейного резонанса играет фундаментальную роль в современной классической механике [3 — 5]. Чтобы не отсылать читателя к цитированным книгам, рассмотрим явление нелинейного резонанса на простейшем примере плоского ротатора, находящегося в поле циркулярно поляризованного излучения

$$H = (\gamma I^2/2) + V \cos(\theta - \omega t). \quad (1.1)$$

В (1.1)  $I$  — момент количества движения,  $\gamma^{-1}$  — момент инерции,  $\theta$  — канонически сопряженная к  $I$  переменная,  $\omega$  — частота внешнего поля,  $V \cos(\theta - \omega t)$  — энергия взаимодействия ротатора с внешним полем. Если под ротатором мы подразумеваем двумерную модель гетерополярной молекулы, то  $V = -Ed$  ( $E$  — амплитуда внешнего поля,  $d$  — дипольный момент молекулы),  $\theta - \omega t$  — угол между векторами дипольного момента и внешнего поля.

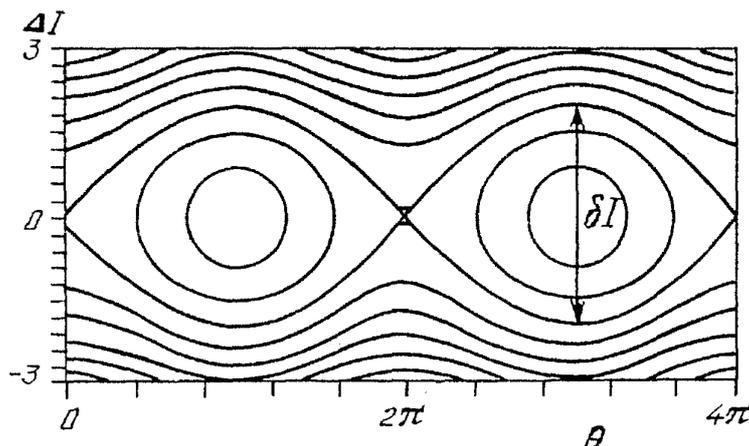
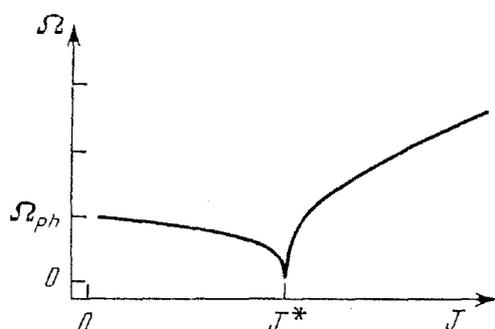
Свободное движение ротатора представляет собой вращение с частотой  $\Omega = \gamma I$ . Если частота вращения ротатора приближенно совпадает с частотой внешнего поля, то ротатор оказывается вовлеченным в нелинейный резонанс и его момент количества движения  $I$  испытывает медленные нутации. Эти медленные движения легко описать, если перейти к переменным  $\Delta I = I - I^*$ , где  $I^*$  — центр резонанса, и  $\Theta = \theta - \omega t$ . Как легко получить из (1.1), изменение переменных  $\Delta I, \Theta$  описывается эффективным гамильтонианом

$$H_{\text{eff}} = [\gamma(\Delta I)^2/2] + V \cos \Theta. \quad (1.2)$$

Гамильтониан (1.2) принято называть гамильтонианом нелинейного резонанса. Отметим, что формально гамильтониан (1.2) совпадает с гамильтонианом математического маятника в поле силы тяжести. Фазовый портрет системы (1.2) представлен на рис. 1. Период движения точки на траектории  $T$  (т.е. период нутаций плоского ротатора) зависит от начальных условий. Для области, близкой к центру резонанса ( $\Delta I \approx 0, \Theta \approx \pi$ ),  $\cos \Theta$  в (1.2) можно разложить в степенной ряд и  $T \approx 2\pi/(\gamma V)^{1/2}$ . Соответствующая частота является одной из двух основных характеристик нелинейного резонанса, и в дальнейшем мы будем называть ее фазовой частотой и обозначать через  $\Omega_{\text{ph}}$ :

$$\Omega_{\text{ph}} = (\gamma V)^{1/2}. \quad (1.3)$$

На рис. 2 представлена зависимость частоты движения по траектории как

Рис. 1. Фазовый портрет системы (1.2) ( $\gamma = 1, \nu = 1$ )Рис. 2. Собственная частота нелинейного резонанса;  $\Omega_{ph} = (\gamma\nu)^{1/2}$ ,  $J^* = (8/\pi)(\nu/\gamma)^{1/2}$ 

функция переменной  $J = (1/2\pi) \oint \Delta I d\Theta$ , которая имеет размерность действия и является характеристикой траектории в фазовом пространстве. (Геометрически  $J$  пропорциональна площади, охватываемой траекторией.) При приближении к сепаратрисе, которой соответствует значение  $J^* = (8/\pi)(\nu/\gamma)^{1/2}$ ,  $\Omega(J)$  стремится к нулю логарифмическим образом. Отметим также, что вторая ветвь на рис. 2 ( $J > J^*$ ) является двукратно вырожденной, что соответствует возможности вращения маятника в разные стороны.

Помимо  $\Omega_{ph}$  другой основной характеристикой нелинейного резонанса является его ширина

$$\delta I = 4(\nu/\gamma)^{1/2}, \quad (1.4)$$

которая соответствует размеру области по действию, ограниченной сепаратрисой. Применительно к нашему примеру  $\delta I$  отражает максимальную амплитуду нутаций ротатора. Заметим, что при переходе через сепаратрису амплитуда нутаций скачкообразно уменьшается в два раза.

**1.2. Примеры изолированного нелинейного резонанса в различных системах.** Мы посчитали целесообразным привести еще два примера нелинейного резонанса с целью показать его универсальную природу. Кроме того, предыдущий пример не отражает типичную ситуацию, поскольку исходный гамильтониан сразу записан в угловых переменных. В качестве второго примера рассмотрим поведение электрона на круговой орбите в классическом атоме водорода под действием циркулярно поляризованного СВЧ поля. В этом примере нам предварительно необходимо перейти к переменным действие—угол. В переменных действие—угол невозмущенный гамильтониан системы имеет вид  $H_0 = -e^4 m / 2h^2 n^2 = -R/2n^2$  (через  $h$  обозначена постоянная Планка  $\hbar$ ), где  $n$  — безразмерное действие ( $n = I/h$ ),  $m, e$  — масса и заряд электрона,  $R$  — постоянная Ридберга. Радиус-вектор электрона

на круговой орбите  $\mathbf{r} = (r(n)\cos \Theta, r(n)\sin \Theta)$  (мы по-прежнему для простоты рассматриваем двумерный случай), где  $r(n) = an^2$  — расстояние от ядра до электрона ( $\alpha = \hbar^2/me^2$ ),  $\theta = \Omega(n)t$ ,  $\Omega(n) = R/n^3$  — частота вращения электрона. Тогда гамильтониан атома в поле циркулярно поляризованного излучения имеет вид

$$H = -(R/2n^2) - eEr(n)\cos(\theta - \omega t).$$

Центр нелинейного резонанса  $n^*$  находим из условия  $\Omega(n^*) = \omega$ . Ограничимся случаем  $n^* \gg 1$  (ридберговский атом). Разложим  $H_0(n)$  с точностью до квадратичных членов в окрестности  $n^*$ , а в возмущении оставим только нулевой член. Переходя к переменным  $\Delta I = \hbar(n - n^*)$ ,  $\Theta = \theta - \omega t$ , мы приходим к гамильтониану (1.2), где  $\gamma = -3R/\hbar^2 n^{*4}$  и  $V = -eEan^{*2}$ . При выполнении условия  $\delta I/\hbar n^* \ll 1$  роль отброшенных членов сводится к незначительным искажениям фазовых кривых на рис. 1 и зависимости  $\Omega(J)$  на рис. 2. Если же последнее условие не выполняется, то нелинейный резонанс имеет несколько более сложную структуру.

В качестве последнего примера рассмотрим слабонелинейный осциллятор (модель колебательной степени свободы молекулы) под действием периодического возмущения

$$H = \Omega I - (\gamma I^2/2) + WI^{1/2}\cos \theta \cdot \cos \omega t$$

( $\omega \sim \Omega$  и предполагается, что  $I$  не слишком велико,  $\gamma I \ll \Omega$ ). Используя резонансное приближение, гамильтониан преобразуем к виду

$$H_{\text{eff}} = (\Omega - \omega)I - (\gamma I^2/2) + (W/2)I^{1/2}\cos \Theta.$$

Качественно фазовый портрет данной системы представлен на рис. 3. Видно, что структура резонанса является довольно сложной и зависит от значения отстройки  $\Delta = \Omega - \omega$ . При выполнении условия  $\delta I < I^*$  (рис. 3,з) структура резонанса практически совпадает со структурой, представленной на рис. 1.

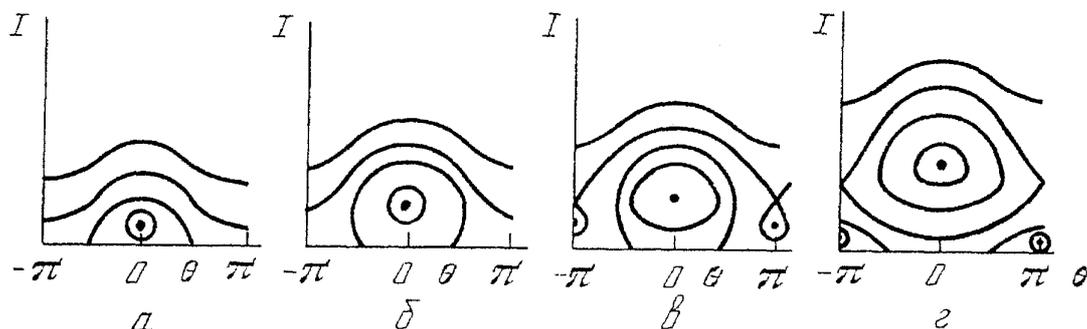


Рис. 3. Структура нелинейного резонанса в молекуле при различных значениях отстройки  $\Delta = \Omega - \omega$  ( $W \sim \gamma$ ,  $\Delta \approx 0$  (а),  $\gamma/2$  (б),  $\gamma$  (в) и  $3\gamma/2$  (г))

**1.3. Квантовый нелинейный резонанс (КНР).** Перейдем к изучению КНР, понятие которого было введено в работах [6 — 9]. Аналогично

тому, как это было сделано в п. 1.1, рассмотрим явление КНР на конкретном примере системы (1.1). Уравнение Шрёдингера для плоского ротатора имеет вид

$$i\hbar\partial\psi(\theta, t)/\partial t = \hat{H}\psi(\theta, t), \quad (1.5)$$

$$\hat{H} = -(\gamma\hbar^2/2)\partial^2/\partial\theta^2 + V\cos(\theta - \omega t). \quad (1.6)$$

В отсутствие возмущения система обладает полным набором собственных функций  $|n\rangle = (2\pi)^{-1/2}\exp(in\theta)$ , которые отвечают свободному вращению ротатора в одну (положительные  $n$ ) и другую (отрицательные  $n$ ) стороны. Внешнее поле вызывает переходы между ближайшими состояниями ротатора, и можно поставить вопрос о динамике населенностей уровней  $|c_n(t)|^2$  ( $\psi(\theta, t) = \sum c_n(t)|n\rangle$ ).

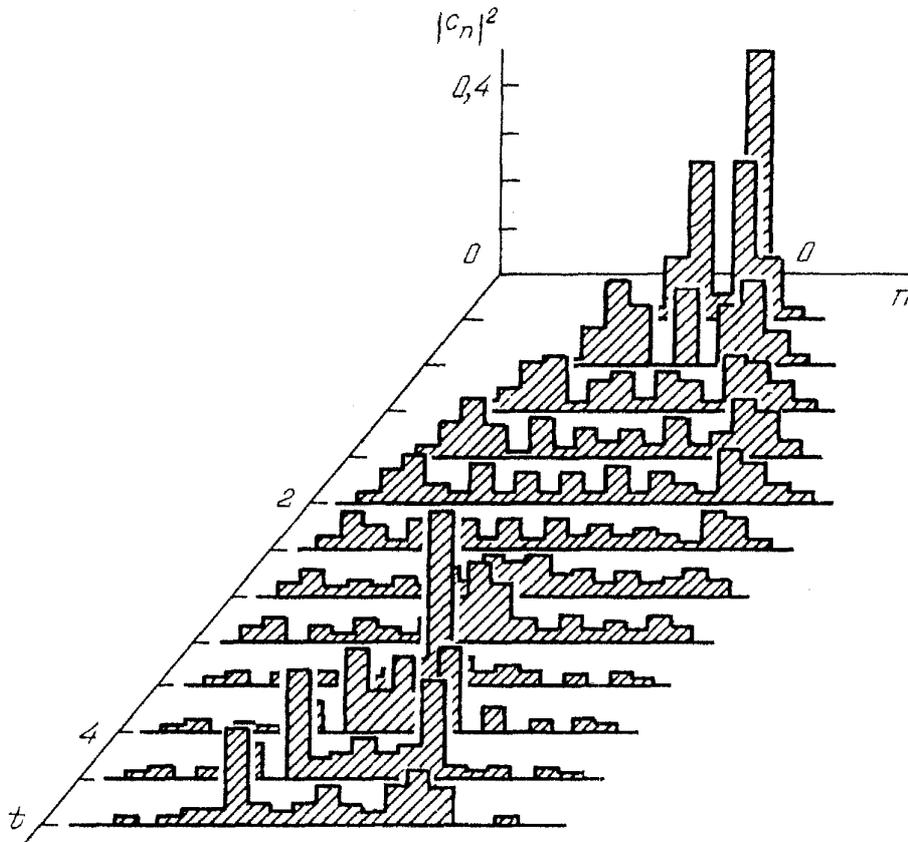


Рис. 4. Динамика населенностей уровней системы (1.6). Значения параметров:  $\gamma = 1$ ,  $V = 1$ ,  $\omega = 0,1$ ,  $\hbar = 1/5$  ( $\Omega_{ph} = 1$ )

На рис. 4 представлен начальный этап эволюции системы (1.6), где в качестве начального условия выбрано заселение единственного уровня  $n^*$ , частота перехода с которого на вышележащий уровень резонансна внешнему полю:  $E_{n^*-1} - E_{n^*} = \hbar\omega$ ,  $E_n = \gamma\hbar^2/2$ . За характерное время  $T = \pi/2\Omega_{ph} \sim \sim (V\gamma)^{-1/2}$  происходит заселение некоторого конечного числа уровней, и дальнейшие переходы имеют место только внутри этой группы уровней. Число захваченных в динамику переходов уровней зависит от местоположения начально заселенного уровня относительно уровня  $n^*$  (центра резонанса). На

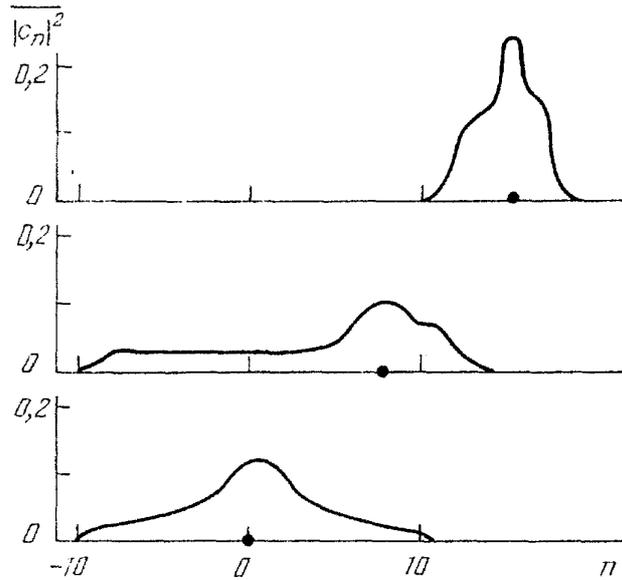


Рис. 5. Средняя (за период фазовых колебаний) населенность уровней систем (1.6). Точками обозначено положение начально заселенного уровня. Значения параметров те же, что и в случае рис. 4. (Рисунок из [10])

рис. 5 представлена усредненная по времени населенность уровней для различных начальных условий (положение начально заселенного уровня обозначено точкой). Видно, что при переходе от случая (б) к (в) произошел "переход через сепаратрису". Данный численный расчет иллюстрирует одну из возможностей "экспериментального" определения ширины КНР. При этом в силу принципа соответствия ширина определяется формулой

$$\delta n = \delta I / h = 4(V/\gamma)^{1/2} / h, \quad (1.7)$$

где  $\delta I$  — ширина классического нелинейного резонанса (1.4). Данный параметр играет важную роль и, как будет показано в дальнейшем, определяет степень классичности КНР. Чем больше значение параметра  $\delta n$ , тем ближе динамика КНР к динамике своего классического аналога. Наоборот, при  $\delta n \rightarrow 0$  КНР вырождается в двухуровневую систему, которая имеет сугубо квантовую динамику.

Помимо динамики населенностей важное значение имеет вопрос о динамике различных наблюдаемых. В дальнейшем мы будем в основном рассматривать динамику наведенной поляризации. Выбор этой величины обусловлен тем, что фурье-спектр наведенной поляризации определяет спектр излучения системы в поле электромагнитной волны. Для двух взаимно перпендикулярных компонент наведенной поляризации имеем

$$P_x = \langle \psi(\theta, t) | \cos \theta | \psi(\theta, t) \rangle, \quad P_y = \langle \psi(\theta, t) | \sin \theta | \psi(\theta, t) \rangle. \quad (1.8)$$

Произведем в (1.5) и (1.6) замену

$$\psi(\theta, t) = \exp(-iE_n \cdot t/h) \phi(\Theta, t) \exp(in^* \Theta), \quad \Theta = \theta - \omega t \quad (1.9)$$

(эта замена эквивалентна переходу к переменным  $\Delta I, \Theta$  при классическом анализе). Тогда для функции  $\phi(\Theta, t)$  имеем  $ih\partial\phi/\partial t = \hat{H}_{\text{eff}}\phi$ , где

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -(\gamma h^2/2)\partial^2/\partial\Theta^2 + V \cos \Theta - ih(\omega - \gamma h n^*)\partial/\partial\Theta \quad (1.10)$$

и последним членом можно пренебречь, поскольку по условию  $\gamma h n^* \approx \omega$ . В дальнейшем гамильтониан (1.10) будем называть гамильтонианом КНР. В новых переменных формулы (1.8) принимают вид

$$P_x = p_c(t)\cos \omega t - p_s(t)\sin \omega t, \quad p_y = p_s(t)\cos \omega t + p_c(t)\sin \omega t, \quad (1.11)$$

$$p_c(t) = \langle \phi(\Theta, t) | \cos \Theta | \phi(\Theta, t) \rangle, \quad p_s(t) = \langle \phi(\Theta, t) | \sin \Theta | \phi(\Theta, t) \rangle.$$

На рис. 6 представлена эволюция  $p_c(t)$  в случае начального заселения единственного уровня  $n^*$  (т.е.  $\phi(\Theta, 0) = (2\pi)^{-1/2}$ ,  $p_s(t)$  в этом случае равняется нулю). Видно, что по истечении двух-трех периодов фазовой частоты  $p_c(t)$  выходит на стационарное значение  $p_c(t) \approx -0,3$ . Отметим, что это значение не связано с частотой и амплитудой внешнего поля и, как будет показано в следующем пункте, является лишь функцией начального состояния системы.

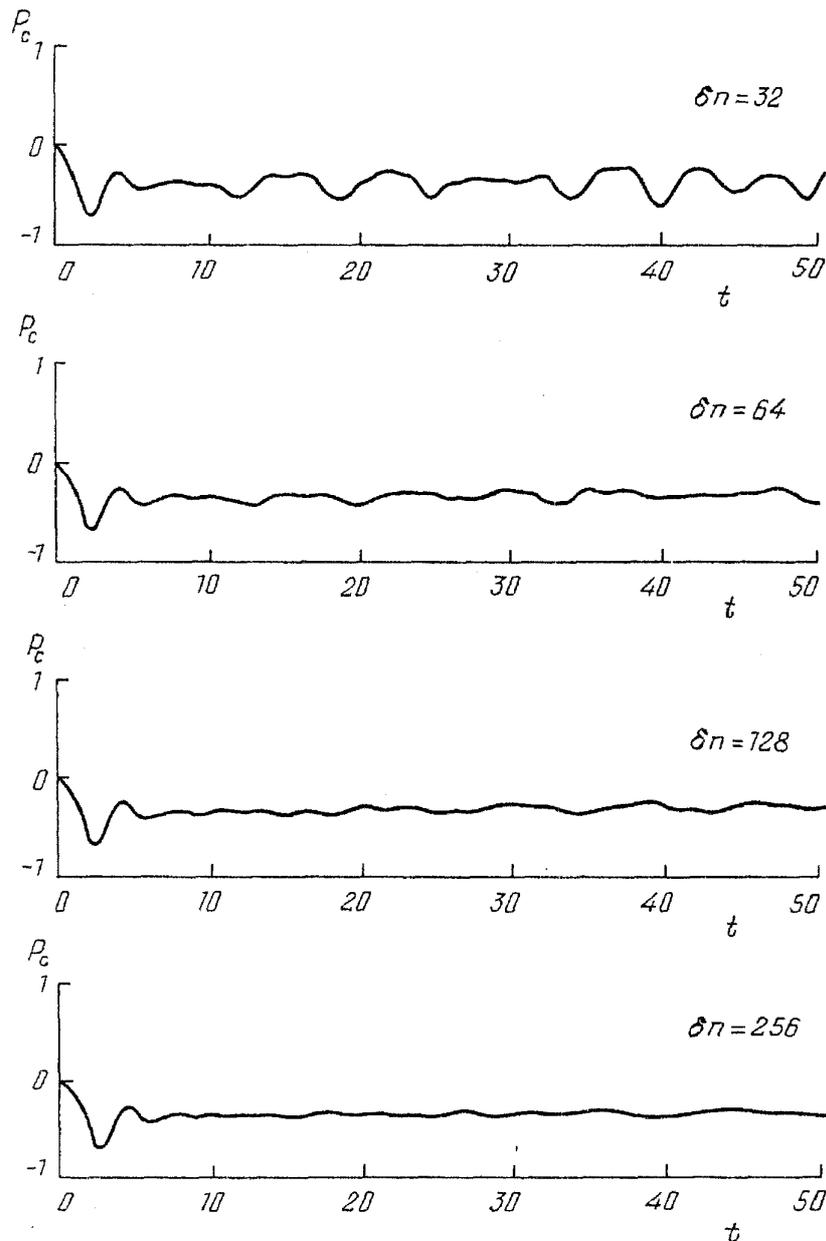


Рис. 6. Динамика  $p_c(t) = \langle \cos \Theta \rangle$  для КНР. Значение параметров:  $\gamma = 1$ ,  $V = 1$ ,  $\omega = 0$ ; в начальный момент времени был заселен единственный уровень с  $n^* = 0$ . Значения постоянной Планка:  $h = 1/8, 1/16, 1/32, 1/64$ . Соответствующие значения параметра квазиклассичности указаны на рисунке

В заключение этого пункта остановимся на влиянии отстройки. В отличие от двухуровневой системы, для КНР варьирование внешней частоты не приводит к заметной смене режима динамики КНР и изменению его основных параметров  $-\Omega_{ph}$  и  $\delta n$ . Действительно, условие точного резонанса имеет вид  $E_{n^*+1} - E_{n^*} = \gamma\hbar(n^* + 1/2) = \omega$ . Отсюда видно, что изменение частоты на величину, большую чем  $\gamma\hbar$ , приводит просто к смещению центра резонанса на другую пару уровней. Варьирование частоты  $\omega$  в пределах нелинейности  $\gamma\hbar$  проявляется лишь в некоторых "тонких" эффектах на временах, существенно превышающих характерное время КНР ( $\sim 1/\Omega_{ph}$ ). Таким образом, понятие отстройки не является достаточно конструктивным и заменяется на понятие "центра КНР".

**1.4. Времена соответствия классической и квантовой динамики.** Обычно при сопоставлении классической и квантовой динамики сравнивают траекторию классической частицы и траекторию центра волнового пакета с хорошо определенными значениями переменных. В случае системы (1.10) также можно сконструировать волновой пакет с хорошо определенными значениями действия и фазы

$$\phi(\Theta, 0) = A \sum_n \exp[-2(n - n_0)^2/\delta n] \exp[in(\Theta - \Theta_0)], \quad n_0 = I_0/\hbar. \quad (1.12)$$

Здесь центр волнового пакета задается величинами  $n_0$  и  $\Theta_0$ , а неопределенность по действию и фазе равны соответственно  $\langle \delta I^2 \rangle^{1/2} \sim \hbar(\delta n)^{1/2} \propto \hbar^{1/2}$ ,  $\langle \delta \Theta^2 \rangle \sim (\delta n)^{-1/2} \propto \hbar^{1/2}$  ( $\delta n$  определено в (1.7)). На рис. 7 представлена зависимость среднего значения  $\langle \cos \Theta \rangle$  при различных значениях  $\delta n$ . Видно, что с увеличением параметра квазиклассичности  $\delta n$  динамика квантовых средних более длительное время следует динамике классической частицы. Можно аналитически показать, что время соответствия растет как  $\delta n^{1/2}$ .

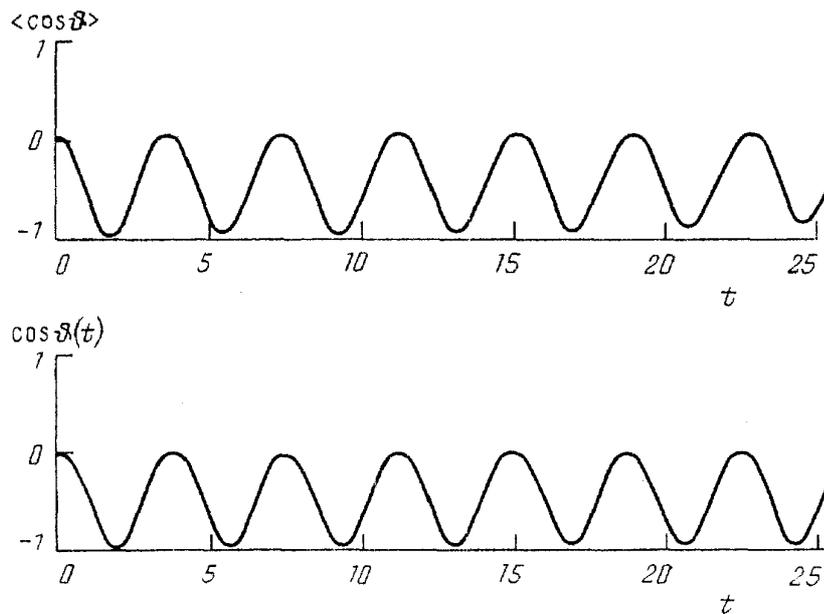


Рис. 7. Динамика квантового среднего  $\langle \cos \Theta \rangle$  в случае начального условия в виде волнового пакета (1.12) при  $\hbar = 1/128$  и динамика классической частицы ( $\hbar = 0$ ). Значения  $I_0 = 0$ ,  $\Theta_0 = 1,57$ ; значения остальных параметров прежние

Однако такое упрощенное понятие времени соответствия, на наш взгляд, является крайне неполным. Дело в том, что квантовая механика имеет принципиально вероятностный характер и по этой причине необходимо сравнивать поведение квантовомеханического среднего с поведением среднего по ансамблю классических частиц. При этом классический ансамбль определяется выбором начального состояния квантовой системы. Имеются два предельных случая, которые соответствуют выбору начального состояния типа (1.12) и

$$\phi(\Theta, 0) = (2\pi)^{-1/2} \exp(in\Theta) \quad (1.13)$$

(строго определено значение действия, фаза полностью не определена). В первом случае мы должны сопоставить квантовому пакету гауссов пакет классических частиц с шириной порядка  $\hbar^{1/2}$ . Во втором случае классический ансамбль представляет собой ансамбль частиц, равномерно распределенных по фазе с о значением действия  $I = \hbar n$ . С точки зрения физических приложений последний случай существенно важнее, так как соответствует заселению в начальный момент времени одного уровня, что легко осуществить в реальном эксперименте.

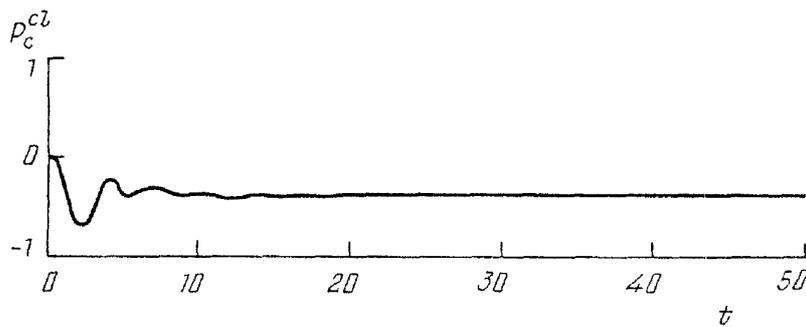


Рис. 8. Динамика среднего значения  $\rho_c^{cl}(t) = \langle\langle \cos \Theta \rangle\rangle$  для системы (1.2) по ансамблю классических частиц, равномерно распределенных в начальный момент времени по фазе с  $I_0 = 0$ . Параметры прежние. (Из [11])

На рис. 8 представлена зависимость среднего значения  $\langle\langle \cos \Theta \rangle\rangle$  по ансамблю классических частиц, равномерно распределенных в начальный момент времени по фазе с  $I(0) = 0$ . Начальный период осцилляции приблизительно определяется частотой  $\Omega_{ph}$  (1.3). В дальнейшем в силу зависимости частоты от начального положения частицы происходит "расфазировка" движения отдельных частиц, и значение  $\langle\langle \cos \Theta \rangle\rangle$  выходит на стационарное значение  $\approx -0,3$ . Графики квантовомеханических средних  $\langle \phi(\Theta, t) | \cos \Theta | \phi(\Theta, t) \rangle$  для  $\phi(\Theta, 0) = (2\pi)^{-1/2}$  были представлены на рис. 6. Сравнение рис. 8 с рис. 6 показывает, что с ростом параметра  $\delta n$  кривые быстро сходятся к своему классическому пределу. При описанной выше схеме численного эксперимента основной вопрос заключается не в определении времени строгого соответствия в поведении классических и квантовых средних, а в определении среднего уровня "квантовых флуктуаций". Вопрос о законе, по которому уровень квантовых флуктуаций уменьшается с уменьшением  $\hbar$  (или, что эквивалентно, с ростом параметра  $\delta n$ ), заслуживает исключительного внимания (так как знание данной зависимости позволило бы количественно указать степень применимости классического подхода) и является мало исследованным к настоящему времени. Мы лишь отметим, что (как будет показано в п. 2.7) этот закон не является универсальным и зависит от типа движения (регулярное или хаотическое) классической системы.

**1.5. Спектральные свойства квантового нелинейного резонанса.** Перейдем к обсуждению спектральных свойств КНР. При изучении поведения квантовых систем под действием периодического возмущения фундаментальную роль играют понятия квазиэнергетических функций (КФ) и спектра квазиэнергий системы, квазиэнергетического спектра (КС). По определению собственная КФ является собственной функцией оператора эволюции системы за период внешнего поля и имеет вид

$$\psi(\theta, t) = \exp(-i\lambda_k t/h)\psi_k(\theta, t), \quad (1.14)$$

где  $\psi_k(\theta, t + T) = \psi_k(\theta, t)$  ( $T$  — период внешнего поля),  $\lambda_k$  — значение квазиэнергии. Заметим, что, как следует из (1.14), квазиэнергии определены с точностью до кратного от частоты внешнего поля (соответственно  $\psi_k(\theta, t)$  определены с точностью до фазового множителя  $\exp(il\omega t)$ ;  $l$  целое). КФ образуют полный базис, и решение уравнения Шрёдингера может быть представлено в виде линейной комбинации КФ

$$\psi(\theta, t) = \sum_k \alpha_k \exp(-i\lambda_k t/h)\psi_k(\theta, t), \quad (1.15)$$

где  $\alpha_k$  определяются из начального условия. Последняя формула отражает важность понятия квазиэнергетических состояний системы. По сути, квазиэнергетические состояния определяют возможную динамику системы, и, зная только КС и структуру КФ, можно, по крайней мере качественно, предсказать поведение различных квантовомеханических средних.

Используя подстановку (1.9), нетрудно показать, что для рассматриваемой системы плоского ротатора КФ  $\psi_k(\theta, t) \sim \phi_k(\theta - \omega t)$ , где  $\phi_k(\theta)$  — собственные функции эффективного гамильтониана (1.10), а собственные значения  $\hat{H}_{\text{eff}}$  определяют КС системы. (Заметим здесь, что формально гамильтониан (1.10) при  $\Delta = \gamma h n^* - \omega = 0$  совпадает с гамильтонианом квантового математического маятника.) На рис. 9 представлен КС системы в виде собственных частот (ср. с рис. 2). По оси ординат отложено значение  $\Omega_k = (\lambda_{k+1} - \lambda_k)/h$ , по оси абсцисс — номер квазиэнергетического состояния  $k$ . Из рисунка видно, что спектр квазиэнергий имеет три ветви. Первая ветвь отвечает "колебательному режиму" ( $k < k^*$ ), вторая и третья ( $k > k^*$ ) отвечают "вращательному режиму". Здесь необходимо сделать небольшое замечание относительно "резонансных" значений  $\Delta$ . В частности, при  $\Delta = 0$  в силу симметричных свойств гамильтониана (1.10) его собственные функции являются либо четными (чет-

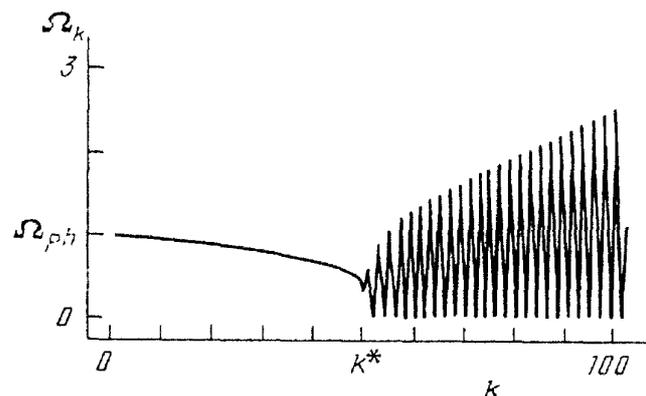


Рис. 9. Собственная частота КНР. По оси ординат отложено значение  $\Omega_k = (\lambda_{k+1} - \lambda_k)/h$ , где  $\lambda_k$  — значение квазиэнергии. Значения параметров:  $V = 1$ ,  $\gamma = 1$ ,  $h = 1/20$ ,  $(\Omega_{\text{ph}} = (\gamma V)^{1/2}$ ,  $k^* = (8/\pi h)(V/\gamma)^{1/2}$ ). (Из [12])

ный индекс  $k$ ), либо нечетными (нечетные  $k$ ) функциями  $\Theta$ . Поэтому при  $\Delta = 0$  вращательные состояния являются суперпозицией вращения в обе стороны. Однако поскольку расщепление уровней является экспоненциально малым, можно сконструировать новые функции

$$\tilde{\varphi}_k(\Theta) = 2^{-1/2}(\phi_{2k}(\Theta) \pm i\phi_{2k+1}(\Theta)), \quad (1.16)$$

которые имеют асимптотику  $\tilde{\varphi}_k(\Theta) = (2\pi)^{-1/2}\exp(\pm ik\Theta)$  при  $k \rightarrow \infty$  и являются собственными приближенно. Данная процедура не является корректной лишь для значений  $k$ , близких к  $k^* = (8/\pi h)(V/\gamma)^{1/2}$ . Эта область соответствует сепаратрисе нелинейного резонанса, где отличие классической системы от квантовой наиболее существенно. В частности, видно, что частота квантового нелинейного резонанса, в отличие от частоты классического, не принимает нулевого значения. Состояния, принадлежащие этой области, невозможно отнести ни к вращательным, ни к колебательным состояниям. Можно получить оценку для ширины этой области (числа уровней квазиэнергий) (см. приложение)

$$\Delta k \sim \ln \delta n, \quad (1.17)$$

где  $\delta n$  — ширина КНР.

Наконец, отметим еще одно отличие КНР от классического нелинейного резонанса, которое связано с возможностью туннелирования через сепаратрису [7 — 9]. Данный эффект туннелирования может быть легко объяснен на основе формулы (1.16). Пусть в начальный момент времени была заселена группа уровней ниже сепаратрисы КНР (отрицательные  $n$ ,  $|n| > \delta n/2$ ). Тогда при  $t = 0$  разложение волновой функции проводится по функциям (1.16) с отрицательными  $k$ . В силу того, что собственное значение  $\lambda_{2k}$  функции  $\phi_{2k}(\Theta)$  не совпадают строго с собственным значением функции  $\phi_{2k+1}(\Theta)$ , с течением времени будет происходить заселение группы уровней, расположенной симметрично (относительно центра резонанса) первоначально заселенной. Характерное время этого процесса определяется величиной  $h/\Delta\lambda$ , где  $\Delta\lambda$  — величина расщепления уровней  $\lambda_{2k}$  и  $\lambda_{2k+1}$ . Это время на много превышает характерное время динамики КНР ( $\sim \Omega_{ph}^{-1}$ ). По этой причине обсуждение эффектов туннелирования как эффектов "второго порядка" мы оставляем в дальнейшем в стороне.

**1.6. Квантовомеханическое представление действие — угол.** В п. 1.3 мы рассмотрели явление КНР на примере системы, гамильтониан которой был сразу записан в угловых переменных. Если исходные переменные задачи не являются угловыми, то предварительно следует перейти к квантовомеханическому представлению действие—угол [13]. Это представление близко к энергетическому представлению, однако является более удобным для наших целей. Рассмотрим переход к представлению действие—угол на примере одномерной системы. Строго говоря, вид представления зависит от того, является ли спектр системы полуограниченным (как, например, в случае линейного осциллятора, где состояния нумеруются индексом  $n \geq 0$ ), или нет ( $-\infty < n < \infty$ ). Однако часто в случае полуограниченного спектра бывает удобно ввести фиктивные уровни с отрицательным индексом  $n$ . Пример такого подхода дан в [14], где рассматривается поведение частицы в прямо-

угловой потенциальной яме под воздействием внешнего периодического поля. Поэтому в дальнейшем мы будем считать, что индекс  $n$  пробегает значения от  $-\infty$  до  $\infty$ .

В основе квантовомеханического представления действие—угол лежат два некоммутирующих оператора  $\hat{I}$  и  $\hat{\Lambda}$ , которые (в энергетическом представлении) имеют вид

$$\begin{aligned} I_{n,m} &= \hbar n \delta_{n,m}, & \Lambda_{n,m} &= \delta_{n+1,m}, \\ [\hat{I}, \hat{\Lambda}] &= -\hbar \hat{\Lambda}, & \hat{\Lambda} \hat{\Lambda}^+ &= \hat{\Lambda}^+ \hat{\Lambda} = \hat{1}. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Тогда любой оператор  $\hat{A}$  можно представить в виде

$$\hat{A} = \sum_{l=0}^{\infty} [\hat{\Lambda}^l a_l(\hat{I}) + \text{э.с.}], \quad (1.19)$$

где  $a_l(\hat{I})$  — операторные функции от  $\hat{I}$ . Если теперь осуществить изоморфизм гильбертова пространства системы на пространство периодических функций  $|n\rangle \leftrightarrow (2\pi)^{-1/2} \exp(in\theta)$ , то оператор  $\hat{A}$  оказывается записанным в угловых переменных. При этом  $\hat{I} = -i\hbar \partial / \partial \theta$ ,  $\hat{\Lambda} = \exp(i\theta)$ .

Можно также показать, что при квазиклассическом подходе функции  $a_l(I)$  есть коэффициенты разложения классической переменной  $A(I, \theta)$  в ряд Фурье. Последнее свойство является чрезвычайно удобным, поскольку часто анализ задачи проводится в квазиклассической области. В этом случае мы просто заменяем в классическом гамильтониане переменную  $I$  на оператор  $\hat{I} = -i\hbar \partial / \partial \theta$ . Ошибка при такой процедуре будет порядка  $\hbar$ . В качестве примера приведем вид гамильтониана для линейного осциллятора в поле периодической волны в представлении действие—угол

$$\hat{H} = \hbar(\Omega(-i\partial/\partial\theta) + 1/2) + (W/2)\cos\omega t \cdot [\exp(-i\theta)(-i\hbar\partial/\partial\theta)^{1/2} + \text{к.с.}].$$

Легко видеть, что в области больших квантовых чисел ни  $1/2$  в первом члене, ни порядок следования операторов во втором не играют роли и данный гамильтониан может быть получен квантованием классического гамильтониана  $H = \Omega I + W I^{1/2} \cos\theta \cdot \cos\omega t$ .

В заключение этого пункта остановимся на операторе фазы (угла). Оператор фазы определяется как  $\hat{\theta} = \theta$ , однако данный оператор определен не на всем пространстве периодических функций, а только на плотном подмножестве, состоящем из функций, принимающих нулевое значение при  $\theta = 0$  и  $\theta = 2\pi$  [15] (легко видеть, что на этом подмножестве  $[\hat{\theta}, \hat{I}] = -i\hbar$ ). Однако для нас данные математические тонкости не существенны, поскольку в реальных физических задачах потребности в операторе фазы не возникают.

**1.7. КНР в системах, не имеющих классического аналога.** В этом пункте мы хотим показать, что понятие КНР может быть существенно расширено, что позволяет использовать концепцию КНР для анализа квантовых систем, не имеющих классического аналога. Основная идея состоит в следующем. Как уже было отмечено выше, динамика квантовых систем во внешнем переменном поле определяется квазиэнергетическими состояниями системы. Поэтому системы с одинаковой структурой КС должны вести себя подобным образом. Определяющими чертами КС КНР является наличие двух ветвей (одна из которых двукратно вырождена), разделенных

"сепаратрисой". Именно это свойство определяет все особенности динамики КНР.

В качестве первого примера рассмотрим двухуровневую систему, которую мы будем ассоциировать с двумя колебательными (электронными) уровнями молекулы, под действием линейно поляризованного резонансного поля [16]. Если молекула фиксирована (т.е. не имеет возможности вращаться), то КС определяется тривиально и имеет вид

$$\lambda_{1,2} = (h\Delta\omega/2) \pm [(Ed/2)^2 \cos^2\theta + (h\Delta\omega/2)^2]^{1/2}, \quad (1.20)$$

где  $\lambda_{1,2}$  — два уровня квазиэнергий,  $\Delta\omega$  — величина отстройки от резонанса,  $E$  — амплитуда внешнего поля,  $d$  — величина матричного элемента перехода,  $\theta$  — угол между вектором поляризации поля и вектором дипольного момента перехода. Если же молекула находится в свободном пространстве, то структура КС является значительно более сложной. При анализе задачи ограничимся двумерным случаем и двухуровневым по колебательной степени свободы приближением. В этом случае волновая функция молекулы может быть представлена в виде

$$\Psi(\theta, t) = \begin{pmatrix} \psi_2(\theta, t) \\ \psi_1(\theta, t) \end{pmatrix}, \quad \psi_\alpha(\theta, t) = (2\pi)^{-1/2} \sum_l c_{l,\alpha}(t) \exp(il\theta), \quad (1.21)$$

где  $c_{l,\alpha}(t)$  — амплитуда населенностей колебательно-вращательного уровня, отвечающего энергии  $E = E_\alpha + Bl^2$  ( $\alpha = 1, 2$ ;  $B$  — вращательная постоянная молекулы). Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_2 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix} - B \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - E \cos \omega t \begin{pmatrix} 0 & d \\ d & 0 \end{pmatrix} \cos \theta, \quad (1.22)$$

и предполагается, что  $(E_2 - E_1)/h - \omega = \Delta\omega \ll \omega$ . (В качестве иллюстрации на рис. 10, *a* представлена структура собственного энергетического спектра системы и переходы, вызываемые внешним полем.) Опуская математическую часть (см. приложение II), сформулируем лишь конечный результат. Собственные квазиэнергетические состояния системы имеют вид

$$\Psi_k(\theta, t) = \exp(-i\lambda_k t/h) \begin{pmatrix} \exp(-i\omega t) & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_2^{(k)}(\theta) \\ \phi_1^{(k)}(\theta) \end{pmatrix}, \quad (1.23)$$

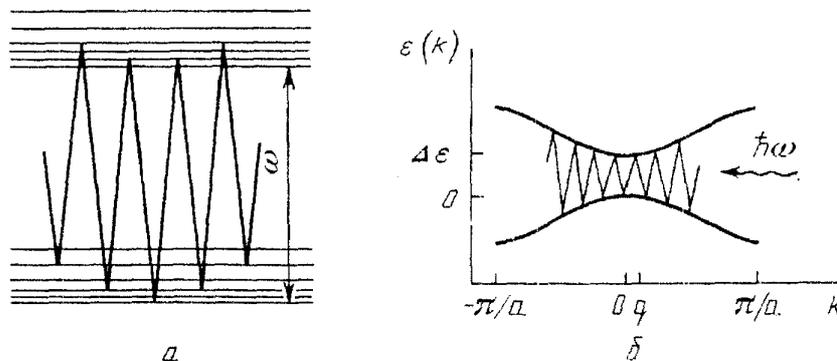


Рис. 10. *a* — Структура энергетических уровней и переходов системы (1.22). *б* — Структура переходов в полупроводнике в поле стоячей волны

где значения квазиэнергий  $\lambda_k$  находим из уравнений на собственные значения следующих эффективных гамильтонианов:

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{(1,2)} = -B\partial^2/\partial\theta^2 + U_{1,2}(\theta), \quad (1.24)$$

$$U_{1,2}(\theta) = \hbar\Delta\omega/2 \pm [(Ed/2)^2\cos^2\theta + (\hbar\Delta\omega/2)^2]^{1/2}.$$

Наиболее простыми являются случаи точного резонанса

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{(1,2)} = -B\partial^2/\partial\theta^2 \pm (Ed/2)\cos\theta \quad (1.25)$$

и случай большой по сравнению с частотой Раби отстройки

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{(2)} = \hbar\Delta\omega - B\partial^2/\partial\theta^2 + (E^2d^2/4\hbar\Delta\omega)\cos^2\theta, \quad (1.26)$$

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)} = -B\partial^2/\partial\theta^2 - (E^2d^2/4\hbar\Delta\omega)\cos^2\theta.$$

В дальнейшем мы вернемся к обсуждению динамики системы (1.22) в этих двух предельных случаях. Здесь же лишь отметим, что, как видно из последних формул, структура КС вращающейся двухуровневой молекулы подобна структуре КС КНР (1.10). Таким образом, мы ожидаем увидеть в динамике системы (1.22) черты, характерные для КНР. Во избежание недоразумений еще раз отметим, что мы в данном обзоре рассматриваем только случай сильного поля, и формула (1.24) приведена именно для этого случая. Более конкретно, глубина потенциальной ямы  $U_{1,2}(\theta)$  в (1.24) предполагается много большей, чем вращательная постоянная молекулы (т.е. в динамику переходов вовлечено большое число уровней).

В качестве второго примера рассмотрим КС электрона в полупроводнике в поле стоячей электромагнитной волны [17]

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - (e/mc)\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\hat{\mathbf{p}};$$

здесь  $\hat{H}_0$  определяет зонную структуру полупроводника  $\epsilon_\alpha(\mathbf{k})$ ,  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  — векторный потенциал:  $\mathbf{A} = (\mathbf{E}c/\omega)\cos(\mathbf{q}\mathbf{r})\cos\omega t$ . Эта задача интересна еще и тем, что, несмотря на трехмерную формулировку, она сводится к одномерной без каких-либо дополнительных приближений. Действительно, пусть волна распространяется вдоль оси  $x$  с поляризацией вектора  $\mathbf{E}$  вдоль оси  $z$ . Тогда нетрудно убедиться, что внешнее поле "связывает" между собой состояния с волновыми векторами  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$  и  $\mathbf{k}' = (k_x \pm q, k_y, k_z)$  (см. рис. 10,б). Таким образом, значения проекции вектора квазиимпульса  $k_y, k_z$  не меняются и их можно рассматривать как параметры задачи. Соответственно на рис. 10,б через  $k$  обозначено  $k_x$ , а  $\epsilon_\alpha(\mathbf{k}) = \epsilon_\alpha(k, k_y, k_z)$ . Из рисунка видно, что структура переходов в полупроводнике аналогична структуре переходов в предыдущем примере. В роли вращательной постоянной выступает величина  $\gamma = \hbar^2q^2/2m_\alpha$ , где  $m_\alpha$  — эффективная масса электрона в зоне. Используя тот же математический прием, что и в предыдущем примере, можно показать, что КС электрона представляет собой  $2\pi/aq$  ( $a$  — период решетки) подзон вдоль направления  $k_x$  и обладает структурой, подобной структуре КНР. В частности, в случае  $m_1 = m_2 = m^*$  и точного равенства частоты внешнего поля энергетической щели эффективный гамильтониан, определяющий по-

ложения границ подзон, имеет вид

$$\hat{H}_{\text{eff}} = 4\gamma^2(-i\partial/\partial\theta)^4 + (E^2 d^2/2)\cos^2\theta,$$

где через  $d$  обозначена величина матричного элемента перехода между зонами ( $d < eh/m\omega a$ ). Для классического аналога  $\hat{H}_{\text{eff}}$ , ( $-i\hbar\partial/\partial\theta \rightarrow I$ ) определено понятие сепаратрисы, и, следовательно, можно ввести понятие ширины резонанса. Как следует из последней формулы, ширина резонанса в полупроводнике, так же как и в случае обычного нелинейного резонанса, пропорциональна квадратному корню от энергии взаимодействия системы с полем.

**1.8. КНР и ориентация молекул ИК полем.** Данный пункт можно рассматривать как пример использования вышеизложенной теории КНР в анализе конкретного физического явления — ориентации молекул внешним высокочастотным полем. Данное явление широко известно в жидкостях и плотных газах, где существенны процессы релаксации. Ниже на основе модели (1.22) мы покажем, что ориентация возможна и в отсутствие процессов релаксации. В этом случае макроскопическая ориентация молекулярного газа является следствием нетривиальной динамики переходов, которая может быть описана в рамках концепции КНР [18].

Рассмотрим случай сильной по сравнению с частотой Раби отстройки  $|Ed/h\Delta\omega| = \varepsilon \ll 1$ . В этом случае КС системы определяется из уравнения на собственные значения эффективных гамильтонианов (1.26). Собственные КФ имеют вид (1.23), причем (см. приложение II) КФ, отвечающие гамильтониану с индексом 1, обладают свойством  $\phi_1^{(k)}(\theta) \sim 1$ ,  $\phi_2^{(k)}(\theta) \sim \varepsilon$ . Наоборот, для КФ, отвечающих гамильтониану с индексом 2, имеем  $\phi_2^{(k)}(\theta) \sim 1$ ,  $\phi_1^{(k)}(\theta) \sim \varepsilon$ . Пусть в начальный момент времени система находилась в основном колебательном состоянии, т.е.  $\psi_2(\theta, 0) = 0$ . Тогда разложение решения по базису КФ (см. формулу (1.15)) имеет место в основном по КФ гамильтониана 1. Опираясь только на этот факт, можно сделать следующие утверждения: в процессе временной эволюции  $\psi_2(\theta, t)$  имеет порядок  $\varepsilon$ , т.е. населенность верхнего колебательного уровня остается пренебрежимо малой;  $\psi_1(\theta, t)$  можно представить в виде суммы медленно и быстро (с характерной частотой  $\Delta\omega$ ) меняющихся членов, причем по абсолютной величине быстро меняющийся член имеет порядок  $\varepsilon$ ; медленно меняющаяся часть  $\psi_1(\theta, t)$  подчиняется уравнению Шрёдингера

$$i\hbar\partial\tilde{\psi}_1(\theta, t)/\partial t = \hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}\tilde{\psi}_1(\theta, t) \quad (1.27)$$

с гамильтонианом (1.26); вектор наведенной поляризации системы параллелен вектору внешнего поля и с точностью до членов порядка  $\varepsilon^2$  имеет вид

$$P(t) = -d(E d/h\Delta\omega)\langle\tilde{\psi}_1(\theta, t)|\cos^2\theta|\tilde{\psi}_1(\theta, t)\rangle\cos\omega t \equiv p(t)\cos\omega t. \quad (1.28)$$

Множитель  $\langle\tilde{\psi}_1|\cos^2\theta|\tilde{\psi}_1\rangle \equiv \langle\cos^2\theta\rangle$  в (1.28), очевидно, характеризует среднюю ориентацию молекул. Равнораспределению молекул по углам соответствует значение  $\langle\cos^2\theta\rangle = 1/2$ . Значение выше 1/2 соответствует преимущественной ориентации молекулы вдоль поля, ниже 1/2 — поперек вектора  $E$ . Заменой

$\theta = 2\Theta$  гамильтониан  $\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}$  преобразуется к гамильтониану нелинейного резонанса, а значение  $\langle \cos^2\theta \rangle$  определяется значением квантовомеханического среднего  $\langle \cos \Theta \rangle$  для КНР:  $\langle \cos^2\theta \rangle = (1 + \langle \cos \Theta \rangle)/2$ . Поскольку в процессе эволюции системы (1.10)  $\langle \cos \Theta \rangle$  принимает значения, отличные от нуля (см. рис. 6), то в молекулярном газе под действием ИК поля будет иметь место преимущественная ориентация молекул в зависимости от знака отстройки  $\Delta\omega$  либо поперек, либо вдоль направления поляризации вектора  $\mathbf{E}$ .

В работе [18] проведено дополнительное исследование процесса ориентации в случае импульсного режима лазера (в этом случае амплитуду поля  $E$  в формулах (1.27), (1.28) следует сменить на огибающую  $E(t)$ ). Оказалось, что при выполнении условия  $\tau^{-1} \gg \Omega_{\text{ph}}$  ( $\tau$  — длительность импульса,  $\Omega_{\text{ph}}$  — фазовая частота КНР) ориентация молекул происходит более эффективно. Заметим, что поскольку средняя ориентация молекул входит в формулу для наведенной поляризации, то эффект ориентации находит свое отражение в

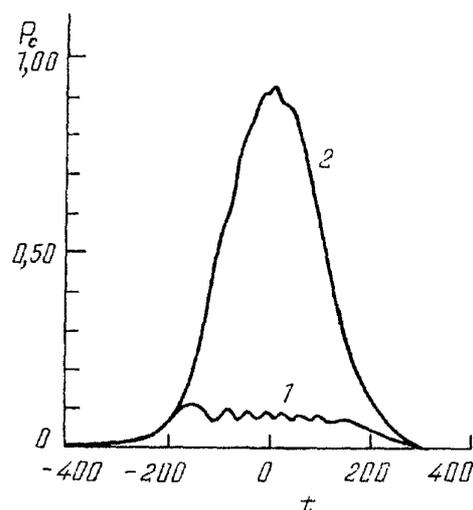


Рис. 11. Динамика нормированной огибающей поляризации. Значение параметров:  $B = 0,00125 \text{ см}^{-1}$ , энергия взаимодействия с полем  $(Ed)^2/4\hbar\Delta\omega = \pm 2 \text{ см}^{-1}$ , длительность импульса  $\tau = 3 \cdot 10^{-10} \text{ с}$ . Период осцилляции кривой 1 определяется периодом фазовых колебаний. (Из [8])

поляризационных свойствах среды. На рис. 11 представлен график нормированной огибающей  $\tilde{p}(t) = p(t)/(d^2 E_{\text{max}}/\hbar\Delta\omega)$  в случае гауссовой формы импульса  $E(t) = E_{\text{max}} \exp[-(t/\tau)^2]$  для двух значений отстройки, равных по величине и противоположных по знаку. Из рисунка видно, что эффект ориентации является весьма значительным и может на порядок менять поляризационные свойства среды. В свою очередь, изменение поляризационных свойств среды в момент прохождения через нее импульса электромагнитного поля будет находить свое отражение в различных физических процессах. В частности, в работе [19] экспериментально исследовано влияние динамической ориентации молекул на процесс нелинейно-оптического смешения частот в парах нафталина.

## 2. Взаимодействие двух нелинейных резонансов

### 2.1. Возникновение хаоса при взаимодействии двух классических нелинейных резонансов. В пп. 1.1, 1.2 мы рас-

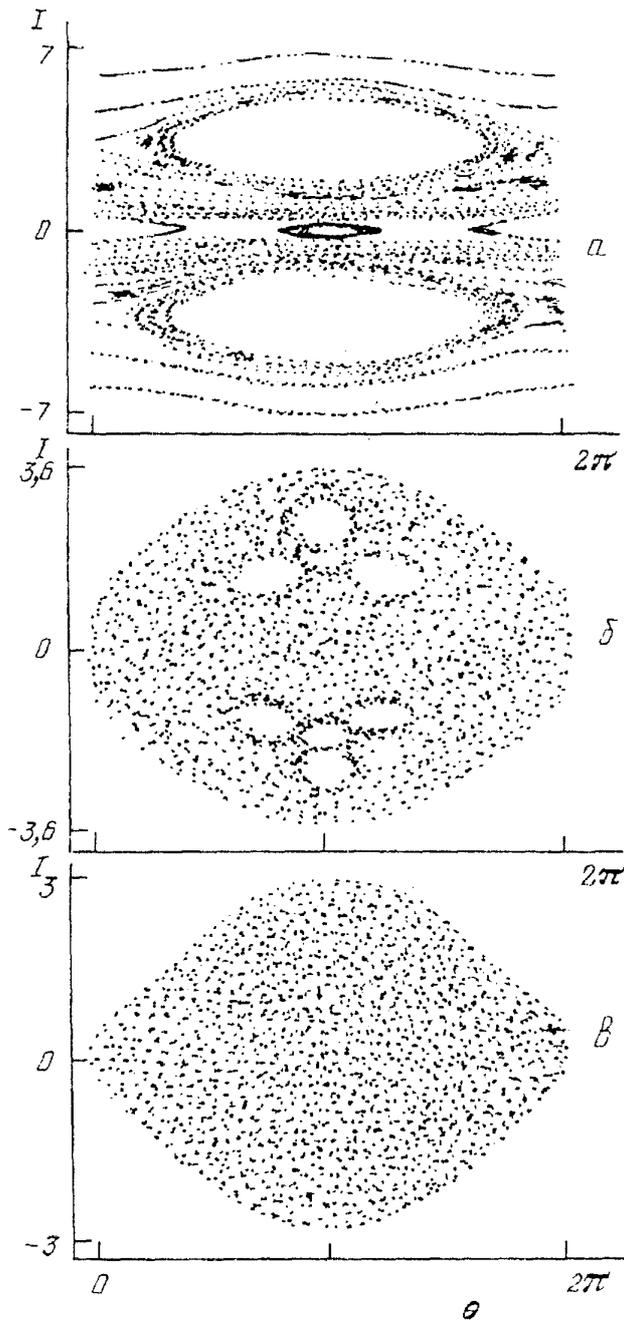


Рис. 12. Структура фазового пространства системы (2.1) при различных значениях параметра  $K$ . Точки соответствуют значениям  $I(t), \theta(t)$  при  $t = Tn$ ;  $T$  — период внешнего поля,  $n$  целое. Значения параметров:  $V = 1$ ,  $\gamma = 1$ ; **a:**  $\omega = 3,5$  ( $K = 0,57$ ), 46 траекторий длительностью  $\leq 100 T$ ; **б:**  $\omega = 1,5$  ( $K = 1,33$ ), одна траектория длительностью 200 периодов; **в:**  $\omega = 0,45$  ( $K = 4,44$ ), одна траектория длительностью 2000  $T$ . Разрушение последней инвариантной кривой, разделяющей нелинейные резонансы, происходит при  $K = 0,97$

нелинейных резонанса при значениях  $I_{1,2}^* = \pm \omega/\gamma$  с шириной  $\delta I$ , определяемой формулой (1.4):  $\delta I = 4(V\gamma)^{1/2}$ . Взаимное влияние резонансов друг на

смотрели явление нелинейного резонанса в классических системах. При этом в качестве примеров мы намеренно выбирали системы, в которых возможен лишь один нелинейный резонанс. Такая ситуация не является типичной. Как правило, в нелинейной системе под действием внешнего поля возникает сразу несколько нелинейных резонансов. При этом взаимное влияние резонансов друг на друга приводит к возникновению областей хаотического движения [3 — 5]. Заметим, что для возникновения хаотической компоненты уже достаточно двух нелинейных резонансов.

В качестве простейшей системы, в которой имеет место явление взаимодействия двух нелинейных резонансов, рассмотрим плоский ротатор под действием линейно поляризованного поля

$$H = (\gamma I^2/2) + 2V \cos \theta \cdot \cos \omega t; \quad (2.1)$$

здесь по-прежнему  $2V = -Ed$ ,  $\theta$  — угол между вектором поля и вектором  $d$ . Эта модель является двумерной идеализацией поляризованной молекулы в СВЧ поле. Разлагая линейно поляризованное поле на две циркулярно поляризованные составляющие  $2V \cos \theta \times \cos \omega t = V[\cos(\theta - \omega t) + \cos(\theta + \omega t)]$ , находим, что в системе имеют место два

друга характеризуется параметром Чирикова перекрытия нелинейных резонансов, который есть отношение суммы полуширин резонансов к расстоянию между ними:

$$K = [(\delta I_1/2) + (\delta I_2/2)] / |\Gamma_2^* - \Gamma_1^*| = 2(\gamma V)^{1/2} / \omega. \quad (2.2)$$

На рис. 12 представлено сечение Пуанкаре для системы (2.1) при различных значениях параметра  $K$ . Сечение построено посредством численного интегрирования уравнений движения за период внешнего поля. Заметим, что рассматриваемой системе с полутора степенями свободы (2.1) может быть поставлена в соответствие система с двумя степенями свободы

$$H_{\text{eff}} = \omega J + (\gamma I^2/2) + 2V \cos \theta \cdot \cos \phi, \quad (2.3)$$

где  $\phi = \omega t$  — фаза поля, а  $J$  — канонически сопряженная переменная к  $\phi$ .  $H_{\text{eff}}$  определяет квазиэнергию системы, которая является интегралом движения. Это обстоятельство использовалось для контроля точности счета.

Из рис. 12 видно, что при малых значениях  $K$  основным следствием влияния нелинейных резонансов друг на друга является возникновение вторичных нелинейных резонансов и тонких стохастических слоев в окрестности сепаратрис нелинейных резонансов. С ростом  $K$  толщина стохастических слоев увеличивается, и при  $K \approx 4$  уже вся центральная область фазового пространства занята стохастической компонентой. Если начальные условия  $I(0)$ ,  $\theta(0)$  принадлежат этой области, то траектория системы  $I(t)$ ,  $\theta(t)$  представляет собой случайный процесс. Мерой "хаотичности" траектории служит показатель экспоненциальной неустойчивости Ляпунова  $\sigma$  [3], который определяет скорость разбегания двух близких при  $t = 0$  траекторий:

$$d(t) \sim d(0) \exp(\sigma t) \quad (2.4)$$

( $d(t)$  — расстояние в фазовом пространстве между двумя близкими траекториями). При используемых далее значениях параметров ( $\gamma = 1$ ,  $V = 0,5$ ,  $\omega = 0,3$ ;  $K = 4,71$ ) численный эксперимент дает среднее значение  $\sigma = 0,1$ . Таким образом, при отличии в начальных условиях на 0,01 две траектории разбегаются по фазе на расстояние порядка  $2\pi$  уже за два-три периода внешнего поля.

В заключение этого пункта заметим, что для рассматриваемой системы выбранное значение  $K \approx 4$  отвечает наибольшей степени хаотичности. Это значение параметра  $K$  отвечает случаю совпадения по порядку величины собственной частоты нелинейного резонанса (1.13) с частотой внешнего поля. Дальнейшее увеличение значения  $K$  приводит к тому, что два резонанса "сливаются" в один, и динамика системы снова близка к регулярной (в этом случае собственная частота существенно превышает частоту внешнего поля и применима адиабатическая теория возмущений [3]).

**2.2. Динамика классических средних.** В дальнейшем для целей сравнения с результатами квантовомеханического анализа системы (2.1) нам необходима информация о поведении средних величин. Ограничимся случаем развитого хаоса, когда  $K \approx 4$ . На рис. 13 представлено поведение

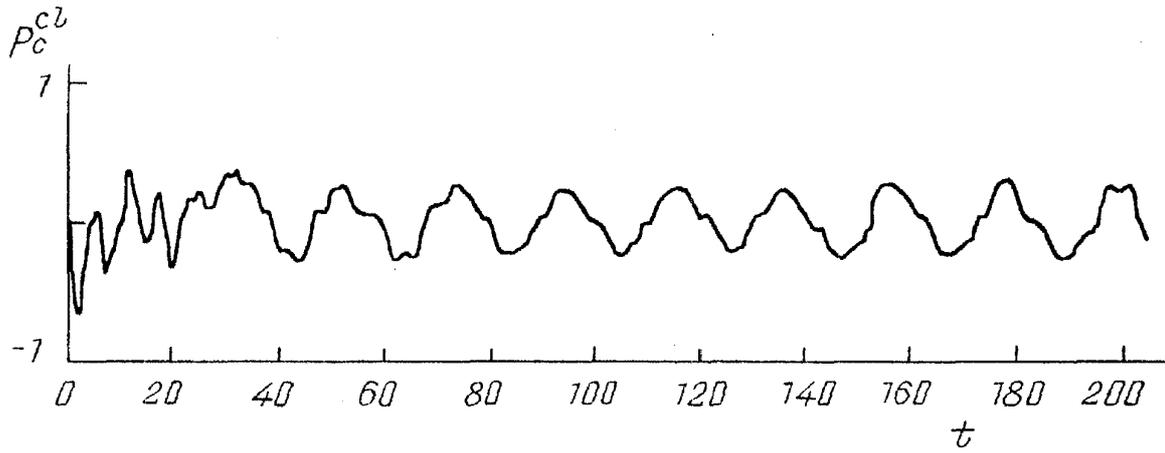


Рис. 13. Динамика среднего значения  $p_c^{cl}(t) = \langle\langle \cos \theta \rangle\rangle$  для системы (2.1) по ансамблю частиц, равномерно распределенных в начальный момент времени по фазе с  $I(0) = 0$ . Значения параметров:  $V = 0,5$ ,  $\gamma = 1$ ,  $\omega = 0,3$  ( $K = 4,71$ ). (Из [16])

$p_c^{cl}(t) = \langle\langle \cos \theta \rangle\rangle$  при значении  $K = 4,71$  ( $V = 0,5$ ,  $\gamma = 1$ ,  $\omega = 0,3$ ; ср. с рис. 8, который соответствует выбору  $\omega = 0$ ). В качестве ансамбля, по которому проводилось усреднение, мы выбрали, так же как и в случае рис. 8, ансамбль частиц, равномерно распределенных по фазе с  $I = 0$  в начальный момент времени. Так как мы ассоциируем систему (2.1) с дипольной молекулой, то  $p_c^{cl}(t)$ , очевидно, характеризует макроскопическую ориентацию молекулярного газа. Из рис. 13 видно, что по истечении 1 — 2 периодов внешнего поля  $p_c^{cl}(t)$  выходит на стационарный режим, который представляет собой периодические колебания с частотой внешнего поля. Начальный этап (вплоть до времен  $t = 30$  на рис. 13) соответствует переходному периоду, в течение которого частицы (представители ансамбля) вследствие экспоненциальной неустойчивости равномерно заполняют весь доступный им фазовый объем. Начиная с этого момента, среднее по ансамблю равняется среднему по фазовому объему хаотической компоненты

$$p_c^{cl}(t) = \langle\langle \cos \theta \rangle\rangle = \int \int_{G(t)} d\theta dI \cos \theta$$

(объем области  $G(t)$  постоянен). Дальнейшие осцилляции  $p_c^{cl}(t)$  связаны с изменением формы доступного частицам фазового пространства  $G(t)$ , которая, как видно из рис. 14, осциллирует с частотой  $\omega$ .

Из сравнения рис. 8 и 13 видно, что как в случае изолированного резонанса, так и в случае системы двух взаимодействующих резонансов поведение средних по истечении относительно короткого времени представляет собой регулярный процесс. Однако есть существенное различие. В случае интегрируемой системы (1.2) вид кривой сильно зависит от вида ансамбля (начальных условий). В случае неинтегрируемой системы (2.1) вид кривой является универсальным и не зависит от начальных условий (с оговоркой, что каждый представитель ансамбля принадлежит хаотической компоненте). Эта универсальность поведения  $p_c^{cl}(t)$  привнесена хаотическим характером движения отдельных частиц. Вследствие этого в системе имеет место перемешивание, и среднее значение по ансамблю от любой величины равняется среднему по фазовому объему и не зависит от выбора ансамбля.

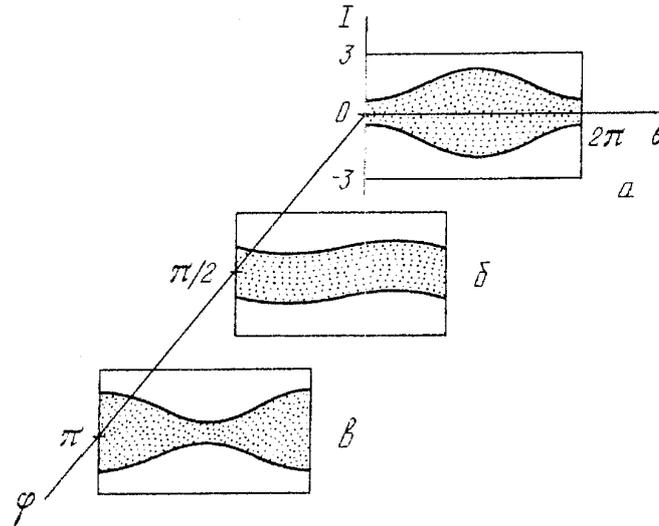


Рис. 14. Сечение Пуанкаре системы (2.1) в различные моменты времени: **a**:  $t_n = Tn$ , **б**:  $t_n = (T/4) + Tn$ , **в**:  $t_n = (T/2) + Tn$ . Значения параметров прежние. Рисунок отражает форму фазового объема системы (2.3), заполненного хаотической компонентой (переменная  $J$  может быть исключена из рассмотрения в силу сохранения квазиэнергии)

**2.3. Взаимодействие КНР.** Система двух взаимодействующих резонансов является одной из простейших моделей классической стохастичности, поэтому представляется естественным использовать ее для исследования квантового хаоса. Следует отметить, что данная модель принципиально отличается от другой популярной модели квантовой хаотичности — квантового ротатора под действием  $\delta$ -импульсов [20] (см. также ссылки в [2]). Последняя модель является простейшим представителем класса систем с неограниченным объемом хаотической компоненты фазового пространства. В этих системах имеет место явление диффузии и при переходе к квантовомеханическому описанию основным эффектом является завал диффузии. Для объяснения явления завала диффузии была привлечена аналогия между локализацией КФ квантового ротатора и андерсеновской локализацией электронов в твердом теле [21]. Этот подход оказался весьма плодотворным и позволил понять особенности диффузии в других квантовых системах с неограниченным хаотическим фазовым объемом (в частности, в атоме водорода под воздействием микроволнового излучения [2]).

Рассматриваемая система двух взаимодействующих резонансов представляет класс систем с конечным объемом хаотического фазового пространства. Здесь отсутствует явление диффузии и требуются иные методы анализа. Квантовый аналог системы (2.1), очевидно, имеет вид

$$\hat{H} = -(\gamma h^2/2)\partial^2/\partial\theta^2 + 2V \cos \theta \cdot \cos \omega t \quad (2.5)$$

(заметим, что при  $\omega = 0$  (2.5) переходит в гамильтониан изолированного КНР (1.10)). Мы рассмотрим свойства системы (2.5) с трех различных позиций. С позиции динамики населенностей уровней, структуры собственных КФ и поведения квантовомеханических средних (наблюдаемых). В качестве наблюдаемой величины мы, так же как и в разделе 1, будем рассматривать наведенную поляризацию (см. (1.8)), нормированную на величину  $d$ :

$$P_x = \langle \psi(\theta, t) | \cos \theta | \psi(\theta, t) \rangle, \quad P_y = \langle \psi | \sin \theta | \psi \rangle. \quad (2.6)$$

На рис. 15 представлена средняя по времени населенность уровней системы при различных значениях величины  $\omega$ . В начальный момент времени

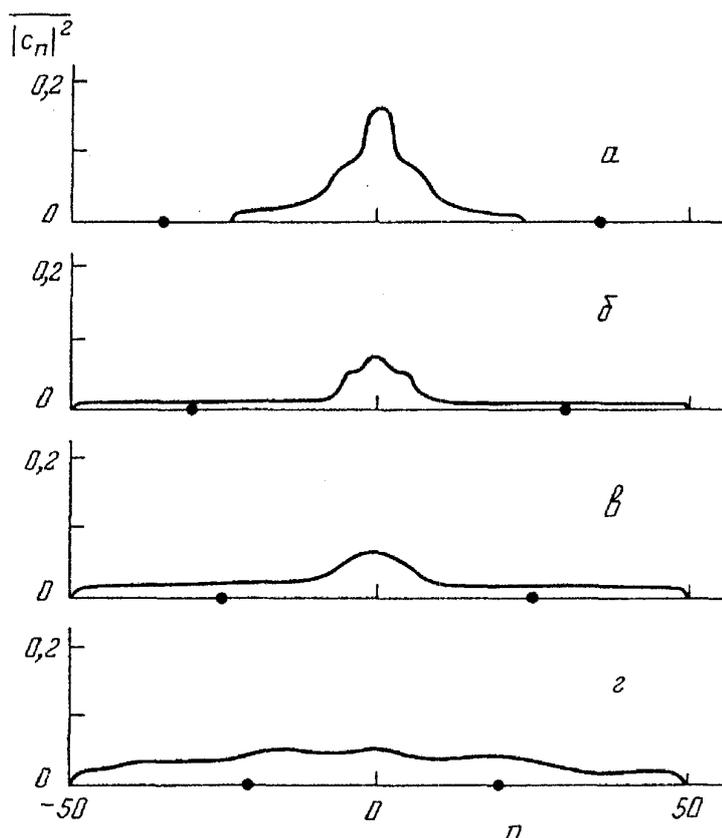


Рис. 15. Средняя населенность уровней системы (2.5). Точками обозначено положение уровней с переходами, резонансными внешней частоте (центры КНР). Значения параметров:  $V=1$ ,  $\gamma=1$ ,  $\hbar=1/10$ ; *a*:  $\omega=3,5$  ( $K=0,57$ ), *б*:  $\omega=3$  ( $K=0,67$ ), *в*:  $\omega=2,5$  ( $K=0,8$ ), *г*:  $\omega=2$  ( $K=1$ ). (Из [10])

было заселено основное состояние системы. Точками на рисунке обозначены уровни, переходы с которых резонансны внешнему полю (т.е. центры резонансов). Напомним, что внешнее поле вызывает переходы лишь между соседними уровнями. Случай *a* соответствует захвату системы во вторичный резонанс (см. рис. 12), который можно рассматривать как изолированный, сл. *б-г* -перекрытые резонансы. В этом случае за время порядка периода фазовых осцилляций происходит заселение конечного числа уровней ( $\sim \delta n$ ), и в дальнейшем населенности этих уровней колеблются без каких-либо видимых закономерностей. Отметим, что в квантовом случае перекрытие нелинейных резонансов происходит несколько раньше (при более низком значении параметра Чирикова (2.2)), чем в классическом. Это связано с тем, что необходимо учитывать конечную ширину переходной области КНР в окрестности сепаратрисы, которая при низких значениях параметра квазиклассичности вносит существенные поправки в критическое значение  $K$ .

**2.4. Структура КФ. Хаотическая делокализация.** Рассмотрим структуру собственных функций оператора эволюции системы за период внешнего поля

$$\hat{U}(\theta) = \hat{T} \exp\left[-(i/\hbar) \int_0^T \hat{H}(t) dt\right] \quad (2.7)$$

в зависимости от значения параметра  $K$ . Важной характеристикой КФ является степень ее делокализации, под которой мы понимаем число эффективно

отличных от нуля коэффициентов в разложении КФ по невозмущенному базису:

$$\psi_k(\theta) = \sum_n c_n |n\rangle.$$

В качестве наглядной характеристики степени делокализации в работе [22] было предложено понятие "дисперсии"  $D$ :

$$D = \sum_n |n - \bar{n}|^2 |c_n|^2, \quad \bar{n} = \sum_n n |c_n|^2.$$

На рис. 16 представлена "дисперсия" КФ как функция ее "центра тяжести"  $\bar{n}$ . Каждой точке соответствует одна КФ. Отметим, что на рис. 16 представлены лишь КФ, обладающие нечетной симметрией, т.е. половина всех КФ. В этом случае разложение проводится по функциям  $|n\rangle = \pi^{-1/2} \sin(n\theta)$ . Диаграмма для четных КФ имеет подобный вид.

Из рисунка видно, что при  $K < K_{cr}$  ( $K_{cr} \sim 1$ ) точки в основном ложатся на три ветви. Такая структура диаграммы отражает структуру КФ изолиро-

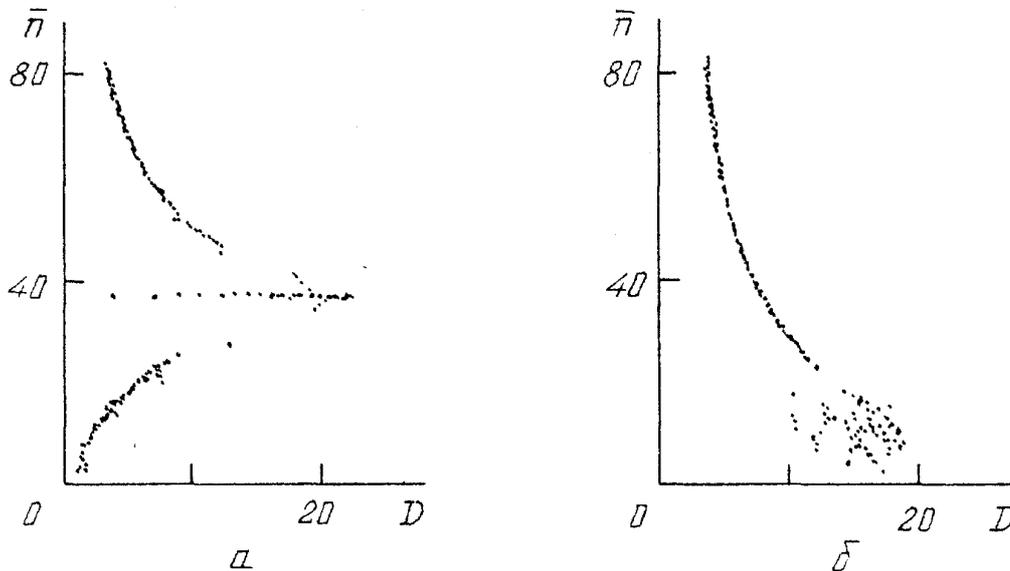


Рис. 16. Зависимость между "дисперсией" и "центром тяжести" собственных функций оператора (2.7). Значение параметров:  $V = 1$ ,  $\gamma = 1$ ,  $h = 1/10$ ; а:  $\omega = 3,5$  ( $K = 0,57$ ) — резонансы не перекрыты, б:  $\omega = 0,45$  ( $K = 4,4$ ) — сильное перекрытие резонансов. (Из [26])

ванных КНР. Средней ветви отвечают КФ, соответствующие колебательному режиму (см. п. 1.5), верхней и нижней — КФ, соответствующие вращательному режиму. При этом наиболее делокализованными являются функции, соответствующие области сепаратрис нелинейных резонансов. Отметим также наличие вторичных КНР, которые выглядят как всплески на нижней ветви. В работе [12] предложен аналитический метод расчета КФ вторичных КНР и показано, что структура вторичных КНР подобна структуре первичных. В этом смысле квантовая система повторяет черты классической (см. рис. 12). Однако если в классическом случае существуют вторичные нелинейные резонансы любого порядка, то в квантовом случае максимальный порядок вторичного КНР определяется из условия  $\delta I^{(k)} \sim h$  ( $\delta I^{(k)}$  — ширина вторичного классического резонанса  $k$ -го порядка). (Более детальное исследование свойств самоподобия квантовых систем в подкритической области параметра  $K$  содержится в работах [23 — 25].)

С ростом параметра перекрытия  $K$  происходит делокализация КФ, принадлежащих нижнему склону, и при  $K \approx 4$  большая группа КФ имеет высокую степень делокализации. Эта группа функций соответствует хаотической компоненте фазового пространства системы взаимодействующих классических резонансов. Из диаграммы видно, что в этой группе отсутствует какая-либо регулярная структура и точки, по крайней мере внешне, расположены случайным образом. Соответственно КС также не обладает регулярной структурой. В этом случае для описания КС целесообразно привлечь статистические методы анализа. (Соответствующий статистический ансамбль можно набрать путем слабого варьирования параметров системы.) Статистический анализ КФ и КС проведен в работе [26]. Здесь мы лишь приведем гистограмму распределения расстояний между ближайшими уровнями квазиэнергий для "хаотической" группы функций (рис. 17). Известно, что для полностью хаотических систем (типа бильярда с отрицательной кривизной) статистика распределения расстояний между ближайшими уровнями близка к функции Вигнера—Дайсона, а для полностью интегрируемых — к функции Пуассона (см. [1, 27]). Как видно из рис. 17, в рассматриваемом случае статистика является промежуточной между статистикой Вигнера—Дайсона и Пуассона.

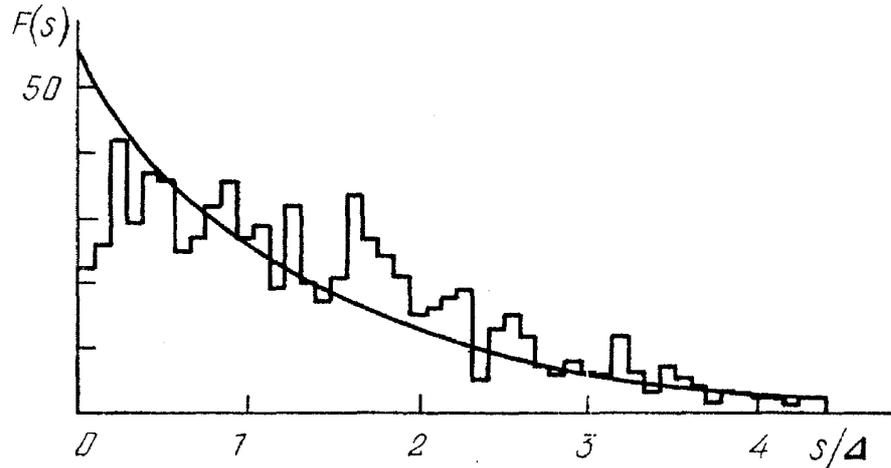


Рис. 17. Распределение расстояния  $s$  между соседними уровнями квазиэнергий для хаотических состояний. Величина  $\Delta$  соответствует среднему расстоянию между уровнями  $\Delta = \hbar\omega/N$  ( $N$  — число уровней). Значение параметров:  $V = 1$ ,  $\gamma = 1$ ,  $\hbar = 1/20$ ,  $0,45 < \omega < 0,46$  ( $K \approx 4,4$ ). Гладкая кривая соответствует распределению Пуассона. (Из [26])

**2.5. Структура КФ. Двумерная делокализация.** Хаотическая делокализация КФ, обсуждавшаяся выше, является важным проявлением хаоса в квантовой системе. Однако представленный выше анализ КФ не является полным. Действительно, при вычислении КФ на основе оператора эволюции (2.7) мы теряем информацию о "временной" зависимости КФ. Эту информацию можно получить следующим образом. Представим собственные КФ в виде двойного ряда Фурье

$$\psi_k(\theta, t) = (2\pi)^{-1} \sum_n \left[ \sum_m c_{n,m}^{(k)} \exp(im\omega t) \right] \exp(in\theta). \quad (2.8)$$

Подставляя квазиэнергетическое решение  $\psi(\theta, t) = \exp(-i\lambda_k t/\hbar)\psi_k(\theta, t)$  в уравнение Шрёдингера с гамильтонианом (2.5), получаем следующее двух-индексное уравнение на значение квазиэнергии  $\lambda_k$ :

$$[(\gamma\hbar^2 n^2/2) + \hbar\omega m]c_{n,m}^{(k)} + (V/4) \sum_{+,-} c_{n\pm 1, m\pm 1}^{(k)} = \lambda_k c_{n,m}^{(k)} \quad (2.9)$$

Заметим, что уравнение (2.9) можно также рассматривать как уравнение на собственные значения эффективного гамильтониана  $\hat{H}_{\text{eff}}$  (2.3), где  $I \rightarrow -i\hbar\partial/\partial\theta$ ,  $J \rightarrow -i\hbar\partial/\partial\phi$ ,  $\phi = \omega t$ . Уравнение (2.9) решалось численно, контроль точности счета осуществлялся на основе условия ортогональности КФ. Характерная структура КФ системы двух взаимодействующих КНР отражена на рис. 18,б, где приведены значения коэффициентов  $c_{n,m}$ . Из рисунка видно,

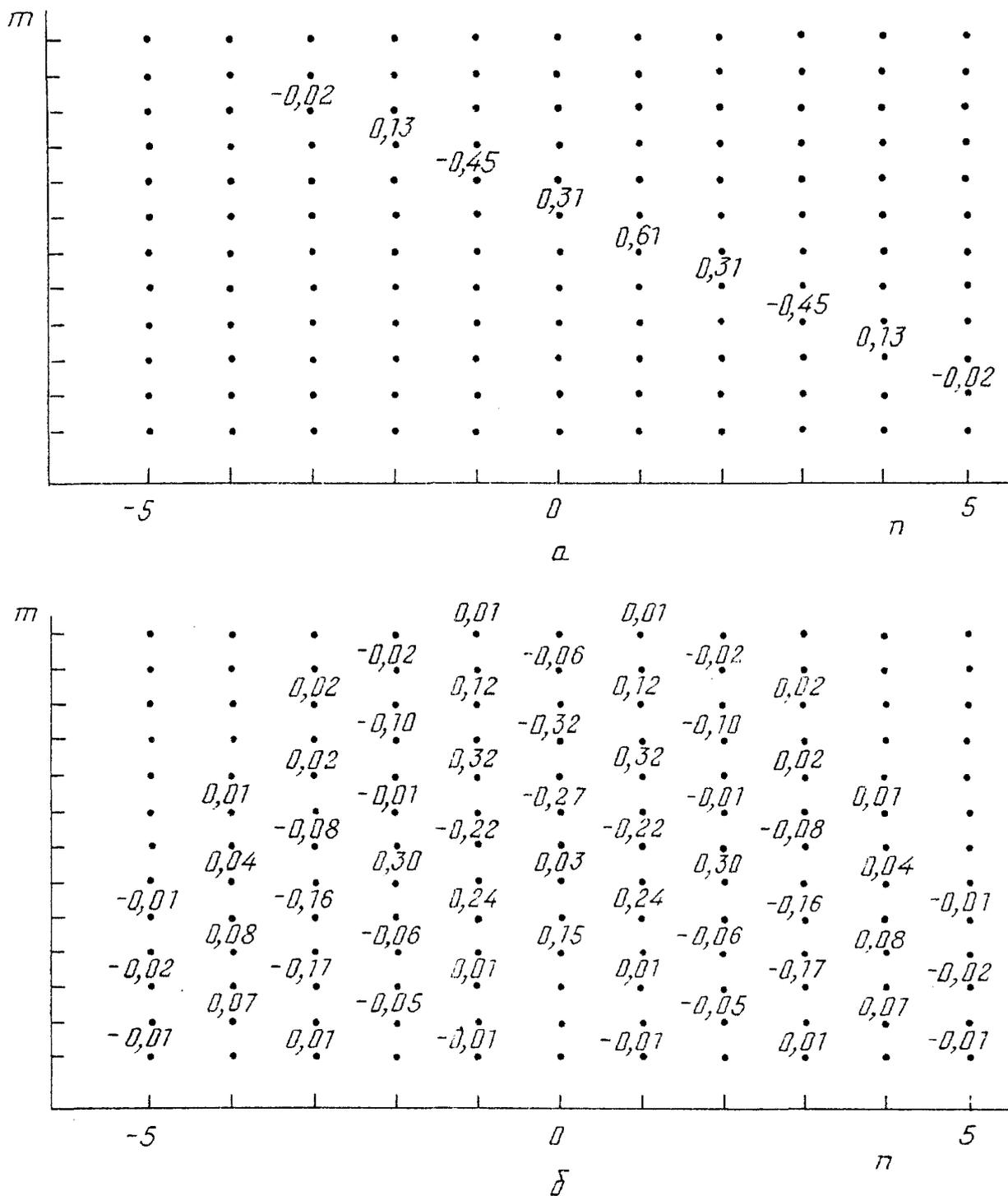


Рис. 18. Структура КФ изолированного КНР (а) и системы двух взаимодействующих КНР (б). Значения параметров:  $V = 2$ ,  $\gamma = 1$ ,  $\omega = 1$ . (Из [28])

что наряду с делокализацией "по оси  $n$ " имеет место делокализация "по оси  $m$ ", т.е. сумма по  $m$  в (2.8) содержит большое число членов. Оценку степени делокализации по  $m$  (число членов  $\delta m$  в сумме по  $m$  в (2.8)) можно получить на основе квазиклассического подхода. Как следует из рис. 14, в хаотическом режиме величина  $I$  меняется в интервале  $\delta I \approx 4(V/\gamma)^{1/2}$ . Поскольку квазиэнергия системы (2.3) является сохраняющейся величиной, то изменение переменной  $I$  сопровождается изменением переменной  $J$  в интервале

$$\delta J \approx \gamma \delta I^2 / 2\omega. \quad (2.10)$$

Развитая стохастичность соответствует выбору внешней частоты  $\omega$  порядка фазовой частоты нелинейного резонанса  $\Omega_{\text{ph}} = (\gamma V)^{1/2}$ . С учетом этого замечания для области изменения  $J$  имеем

$$\delta J \approx \delta I^2 / 2(\gamma V)^{1/2} = 4(V/\gamma)^{1/2} = \delta I.$$

Квантуя переменные  $I, J$ , получаем характерную степень делокализации КФ:  $\delta m \sim \delta n \sim \delta I/h$ .

Делокализация КФ по оси  $m$  является сильным проявлением хаоса в обсуждаемой квантовой системе и приводит, как будет показано в следующем пункте, к важным физическим следствиям. Заметим, что в случае регулярного режима движения делокализация вдоль оси  $m$  отсутствует: в качестве иллюстрации на рис. 18,а представлена структура КФ изолированного КНР (1.6). Видно, что отличны от нуля только коэффициенты  $c_{n,m}$  с  $n + m = \text{const}$ , т.е. сумма по  $m$  в (2.8) содержит только один член (этот результат легко получить аналитически из (1.9)). В случае  $K \ll 1$  (два резонанса, слабое взаимодействие) структура КФ близка к приведенной на рис. 18,а (на двух соседних диагоналях появляются элементы, слабо отличные от нуля) и может быть рассчитана по теории возмущений.

**2.6. Спектр наведенной поляризации.** Перейдем к обсуждению физических следствий двумерной делокализации. Рассмотрим квантовомеханическое среднее от произвольного оператора:  $\langle A(t) \rangle = \langle \psi(\theta, t) | \hat{A} | \psi(\theta, t) \rangle$ . В силу (1.15) справедливо разложение

$$\langle A(t) \rangle = \sum a_k^* a_l^* \exp[i(\lambda_l - \lambda_k)t/h] \langle \psi_l(\theta, t) | \hat{A} | \psi_k(\theta, t) \rangle. \quad (2.11)$$

Оценим число линий  $N$  в частотном спектре переменной  $\langle A(t) \rangle$ . Пусть начальное состояние системы соответствует основному состоянию. Тогда очевидно, что число отличных от нуля коэффициентов  $a_k$  определяется степенью **делокализации**  $\delta n$ . Таким образом, в спектре  $\langle A(t) \rangle$  будет присутствовать  $\sim \delta n^2/2$  линий на частотах  $(\lambda_l - \lambda_k)/h$ . Теперь учтем, что функции  $\psi_k(\theta, t)$  являются периодическими функциями времени. В результате этого каждая линия "превращается" в серию линий, отстоящих друг от друга на величину, кратную  $\omega$ . Однако если в хаотическом режиме спектр  $\langle \psi_l(\theta, t) | \hat{A} | \psi_k(\theta, t) \rangle$  состоит из порядка  $\delta m$  линий, то в регулярном случае мы имеем лишь несколько линий и число их *не растет* с ростом параметра квазиклассичности  $\delta n$ . Суммируя вышеизложенное, получаем следующую оценку для числа линий  $N$  в частотном спектре:

$$N \sim \delta n^\alpha, \quad (2.12)$$

где  $\alpha = 2$  для случая регулярной динамики и  $\alpha = 3$  для хаотической. Заметим,

что приведенная оценка является верхней, и для более точной оценки величины  $N$  требуются дополнительные исследования. Однако ясно, что в хаотическом режиме значение  $\alpha$  всегда выше, чем в регулярном.

На рис. 19 б представлен фурье-спектр  $A(\omega)$  ( $A(\omega) = \langle A(t) \rangle \exp(i\omega t)$ ), черта

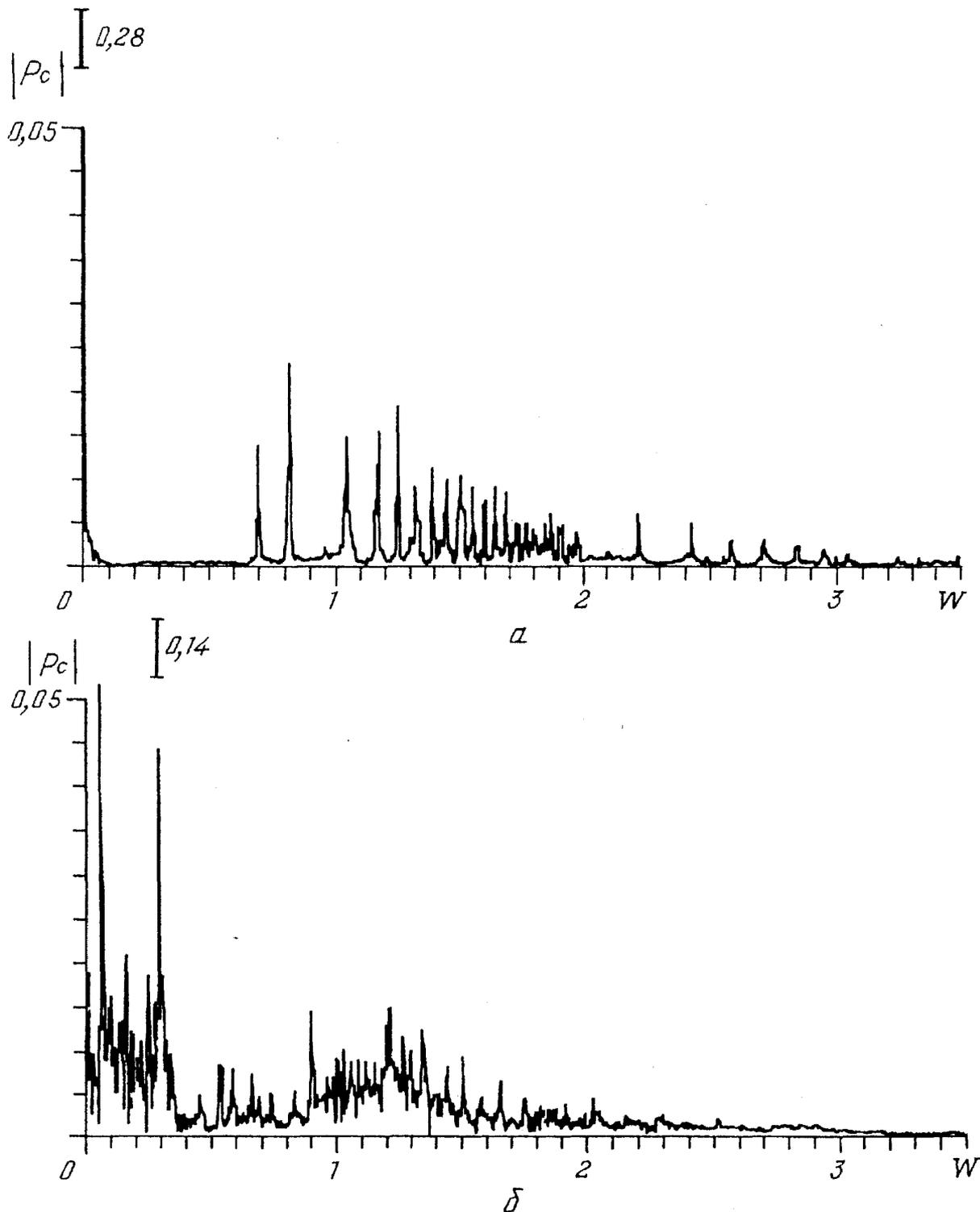


Рис. 19. Спектр наведенной поляризации в случае хаотической (б) и регулярной (а) динамики системы (2.5). Значения параметров:  $V=0,5$ ,  $\gamma = 1$ ,  $h = 1/16$ ; а:  $\omega = 0,3$  ( $K = 4,71$ ),  $\bar{a}: \omega = 0$ . Время усреднения  $T = 840$ . (Здесь и далее приведен спектр только для положительных значений  $\omega$ , для отрицательных  $\omega$  график симметричен приведенному.) (Из [11])

означает усреднение по времени) наблюдаемой  $\hat{A} = \cos \theta$  для системы (2.5) при следующих значениях параметров  $\gamma = 1$ ,  $V = 0,5$ ,  $\omega = 0,3$  ( $K = 4,71$ ),  $\hbar = 1/16$  и заселении в начальный момент времени основного состояния. Согласно (2.6)  $\langle \cos \theta \rangle$  является нормированной наведенной поляризацией вдоль направления внешнего поля:  $P_x(t) = p_c(t)$ . (Заметим, что в случае симметричного начального условия  $P_y(t) \equiv 0$ ). Как уже отмечалось выше, спектр наведенной поляризации определяет спектр излучения системы и может быть исследован экспериментально. На рис. 19,а представлен частотный спектр  $p_c(t)$  для случая регулярного режима движения, что соответствует выбору  $\omega = 0$ . Время усреднения выбрано равным  $T = 840$ . Из сравнения рис. 19,а и б видно, что в регулярном случае спектр  $p_c(t)$  состоит из небольшого числа хорошо разрешенных линий. В хаотическом случае число линий значительно больше. Этот эффект — следствие двумерной делокализации и является одним из наиболее ярких проявлений хаоса в квантовой механике для систем с ограниченным объемом хаотической компоненты. Следует отметить, что в рассматриваемом случае (молекула в СВЧ поле) для регистрации данного эффекта необходима высокая степень разрешения. При низкой степени разрешения (малые времена усреднения в численном эксперименте) качественное различие между двумя случаями теряется. В п. 2.9 мы обсудим поведение молекулы в ИК поле, где обсуждаемый эффект проявляется значительно ярче и различие в спектре наведенной поляризации для хаотического и регулярного случаев остаются на качественном уровне даже при низкой степени разрешения.

**2.7. Времена соответствия.** Обсуждение проблемы о временах соответствия начнем с вопроса о связи между динамикой волнового пакета (1.12) и динамикой отдельной классической частицы. Нетрудно показать, что в этом случае времена соответствия являются логарифмически малыми. Действительно, квантовому пакету (1.12) мы ставим в соответствие пакет классических частиц с шириной по действию порядка  $\hbar(\delta n)^{1/2}$  и по фазе — порядка  $\delta n^{-1/2}$ . В силу локальной неустойчивости (2.4) огрубленный размер пакета будет расти как  $\exp(\sigma t)$  и в течение характерного времени

$$\tau \sim \ln(2\pi/\delta n^{-1/2})/\sigma \propto \ln(1/\hbar) \quad (2.13)$$

пакет "расплывется" по фазе на величину порядка  $2\pi$ . Таким образом, по истечении времени  $\tau$  ни динамика средних по классическому ансамблю, ни тем более динамика квантовых средних не будут следовать траектории классической частицы, соответствующей в начальный момент времени центру пакета. Время (2.13) можно получить и более строгим образом, исходя непосредственно из уравнения Шрёдингера.

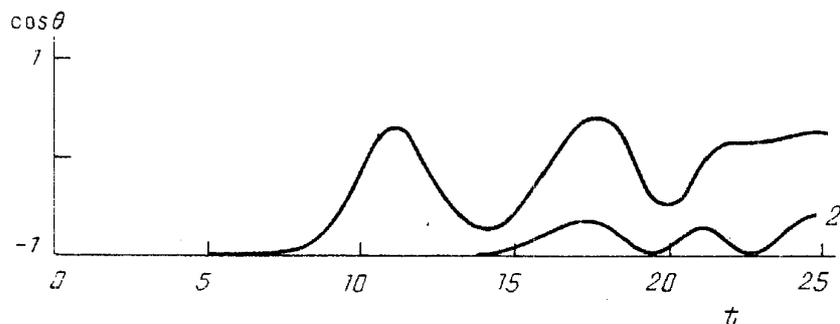


Рис. 20. Динамика квантового среднего  $\langle \cos \theta \rangle$  системы (2.5) ( $V = 0,5$ ,  $\gamma = 1$ ,  $\omega = 0,3$ ,  $\hbar = 1/128$ ) в случае выбора начального условия в виде волнового пакета (1.12) с  $I_0 = 0$ ,  $\theta_0 = 3,14$  (1) и значение  $\cos \theta(t)$  для классической частицы с этими же начальными условиями (2) (данная траектория является хаотической с  $\sigma = 0,4$ )

редственно из квазиклассического представления волновой функции [29]. В качестве иллюстрации вышеизложенного на рис. 20 представлены графики  $\cos \theta(t)$  для классической частицы с начальными условиями  $I(0) = 0$ ,  $\theta(0) = 3,14$  (эта траектория является хаотической со значением параметра локальной неустойчивости  $\sigma = 0,4$ ) и квантового среднего  $\langle \cos \theta \rangle$  для начальной волновой функции вида (1.12) при  $\hbar = 1/128$ . Видно, что время соответствия практически отсутствует. Напомним, что в регулярном случае (см. рис. 7) при тех же значениях постоянной Планка и параметрах системы время соответствия достаточно велико. Заканчивая данный абзац, мы хотели бы привлечь внимание к работе [30], посвященной сравнению эволюции функции Вигнера и огрубленной функции Вигнера с эволюцией классической функции распределения именно для случая начального условия в виде гауссова пакета с шириной  $\sim \hbar^{1/2}$ .

Перейдем к случаю начального условия вида (1.13). Несмотря на то, что в хаотическом режиме нет соответствия между поведением отдельной классической частицы и квантовым пакетом, для динамики средних соответствие

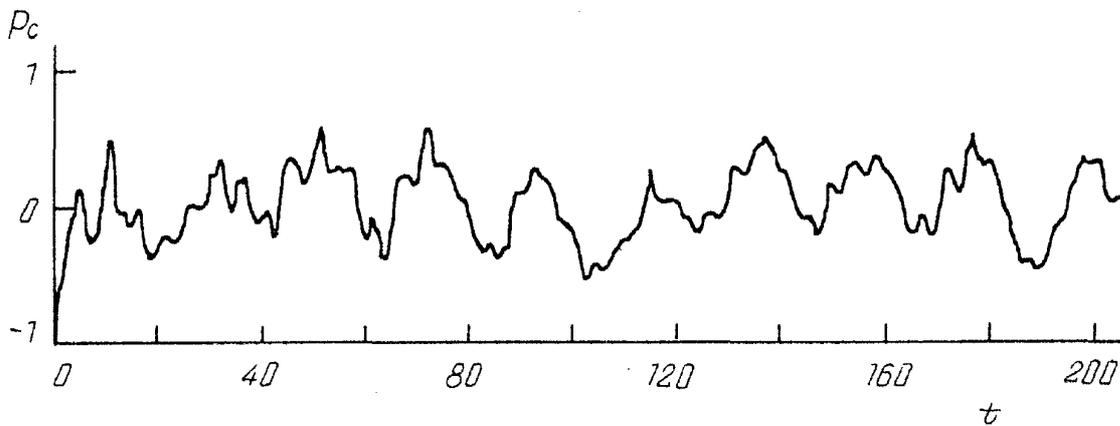


Рис. 21. Динамика среднего значения  $p_c(t) = \langle \cos \theta \rangle$  квантовой системы (2.5) в случае начального условия в виде заселения единственного уровня с  $n = 0$ . Значение  $\hbar = 1/16$ , остальные параметры прежние. (Из [11])

есть, и в квантовом случае график квантовомеханического среднего  $\langle \cos \theta \rangle$  повторяет в общих чертах график среднего по классическому ансамблю (см. рис. 13) даже при низких значениях параметра квазиклассичности (рис. 21). Как уже отмечалось в п. 1.1, в данном случае вопрос о временах соответствия переходит в вопрос об уровне квантовых флуктуаций. На рис. 22 представлена зависимость среднего уровня флуктуаций

$$S^2 = (\langle \cos \theta \rangle - \langle \langle \cos \theta \rangle \rangle)^2$$

(здесь  $\langle \cos \theta \rangle$  — квантовомеханическое среднее,  $\langle \langle \cos \theta \rangle \rangle$  — классическое среднее) и значения постоянной Планка  $\hbar = (1/2)^M$  для регулярной и хаотической динамики. Видно, что в регулярном случае сходимость значительно лучше. На настоящий момент мы не можем с уверенностью указать закон, по которому происходит уменьшение уровня флуктуаций с уменьшением  $\hbar$ . Этот вопрос

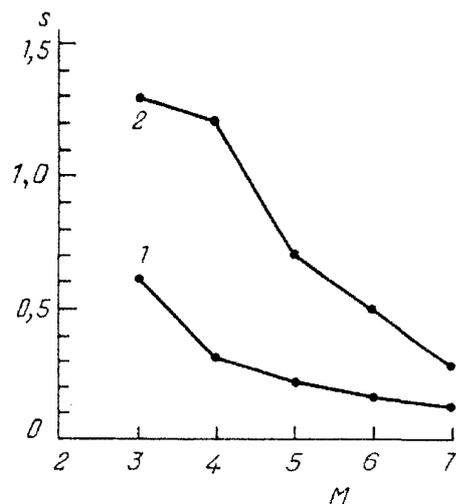


Рис. 22. Средний уровень квантовых флуктуаций как функция  $\hbar = (1/2)^M$  в случае регулярной (1) и хаотической (2) динамики системы. Значения параметров прежние, время усреднения  $T=50$

нуждается в дополнительном исследовании.

В заключение этого пункта отметим еще один подход к вопросу о соответствии классического и квантовомеханического описания динамической системы, основанный на сравнении спектров наблюдаемых. Как нетрудно показать, в классическом случае спектр является непрерывным. В частности, спектр процесса, отображенного на рис. 8, определяется соотношением

$$p_c^{cl}(w) = \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{J^*} b_k(J) \delta(w - k\Omega(J)) dJ, \quad (2.14)$$

где  $b_k(J)$  — некоторые функции от  $J$ ,  $J^* = \delta J / 2\pi$ , график  $\Omega(J)$  представлен на рис. 2 (при выводе (2.14) мы перешли от интегрирования по начальной фазе  $\theta_0$  к интегрированию по  $J$  и учли, что  $\cos \theta(t, \theta_0)$  есть периодический процесс с частотой  $\Omega(J)$ ). В квантовом случае частотный спектр наблюдаемой  $p_c(w)$  является дискретным. Однако при конечной степени разрешения (конечные времена наблюдения) спектр наблюдаемой величины есть свертка от дискретного спектра и аппаратной функции  $F(w)$  и также является непрерывным (в численном эксперименте  $F(w)$  определяется временем наблюдения  $T$ :  $|F(w)| = 2 \sin(wT/2)/wT$ ). Таким образом, мы можем исследовать закон, по которому "квантовый" спектр приближается к "классическому" в зависимости от значения постоянной Планка и времени наблюдения. Исследования такого рода представляют значительный интерес, особенно для интерпретации экспериментальных результатов по анализу частотных спектров хаотических систем.

**2.8. Дипольная молекула в СВЧ поле.** В предыдущих пунктах нашей основной моделью был плоский ротатор под воздействием периодического циркулярно и линейно поляризованного поля. Очевидно, что эта система является двумерной идеализацией дипольной молекулы в СВЧ поле. В этом пункте мы покажем, что данная идеализация в случае линейно поляризованного поля является вполне правомерной и переход к трехмерному случаю не влечет за собой существенных изменений в теории.

Направим ось  $z$  параллельно вектору поляризации внешнего поля. Тогда гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - Ed \cos \theta \cdot \cos \omega t, \quad (2.15)$$

где  $\hat{H}_0$  соответствует свободному вращению молекулы. Собственными функциями  $H_0$  являются сферические функции  $\Phi_{l,m}$ , которые отвечают собственному значению  $E_l = B l(l+1)$  ( $B$  — вращательная постоянная молекулы) и  $|m| \leq l$ . Представим волновую функцию системы в виде разложения по сферическим функциям

$$\psi(t) = \sum_{l,m} a_l^{(m)}(t) \Phi_{l,m}. \quad (2.16)$$

Подставляя (2.16) в (2.15), получаем следующую систему уравнений на амплитуды населенностей уровней:

$$i\hbar \partial a_l^{(m)} / \partial t = E_l a_l^{(m)} - (Ed/2)(V_{l-1}^{(m)} a_{l-1}^{(m)} + V_{l+1}^{(m)} a_{l+1}^{(m)}) \cos \omega t, \quad (2.17)$$

$$V\}^m) = [(l - m)(l + m)/(2l - 1)(2l + 1)]^{1/2}.$$

Из (2.17) видно, что магнитное квантовое число не меняется в процессе взаимодействия системы с полем и является параметром задачи. С учетом этого обстоятельства систему уравнений (2.17) можно переписать в более "красивом" виде. Обозначим  $c_n(t) = a_{n+m-1}^{(m)}(t)$ , тогда индекс  $n = l - m + 1$  пробегает значения от 1 до  $\infty$  и (2.17) принимает вид

$$i\hbar \partial c_n / \partial t = \tilde{E}_n c_n - (Ed/2)(\tilde{V}_n c_{n-1} + \tilde{V}_{n+1} c_{n+1}) \cos \omega t, \quad (2.18)$$

$$\tilde{V}_n = [(n - 1)(n + 2m - 1)/(2n + 2m - 1)(2n + 2m + 1)]^{1/2},$$

$$\tilde{E}_n = B(n + m + 1)(n + m).$$

Теперь видно, что система (2.18) эквивалентна системе уравнений на амплитуды населенностей плоского ротатора (2.5) при дополнительном условии, что мы рассматриваем лишь нечетные по  $\theta$  решения ( $\psi(\theta, t) =$

$$= \pi^{-1/2} \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) \sin(n\theta):$$

$$i\hbar \partial c_n / \partial t = Bn^2 c_n - (Ed/2)(V_n c_{n-1} + V_{n+1} c_{n+1}) \cos \omega t, \quad (2.19)$$

$$V_1 = 0, \quad V_n = 1/2 (n > 1), \quad B = \gamma \hbar^2 / 2.$$

Таким образом, вращающаяся полярная молекула, взаимодействующая с резонансным СВЧ полем, реализует два КНР с параметром перекрытия резонансов  $K = \delta n / n^*$ , где  $\delta n$  — ширина КНР  $\delta n = 2(Ed/B)^{1/2}$  и  $n^*$  — центр КНР  $n^* = (\omega - B)/2B$ . Наибольшего совпадения с плоским ротатором мы достигаем, как и следовало ожидать, в случае  $m = 0$ . Тогда  $E_n = Bn(n - 1)$  и  $\tilde{V}_n = [(n - 1)n/(2n - 1)(2n + 1)]^{1/2}$  вместо  $E_n = Bn^2$  и  $V_n = 1/2$  для плоского ротатора. Данные различия вносят лишь небольшие количественные расхождения в динамику систем (2.15) и (2.19). В общем случае параметром, определяющим степень расхождения, является отношение расстояния до центра КНР  $n^*$  к значению магнитного квантового числа  $m$ . В дальнейшем мы будем предполагать, что  $n^*/m \gg 1$ , так что для анализа вращательной динамики молекулы можно использовать двумерную модель.

Остановимся на характерных значениях параметров. Основным условием применимости изложенной в предыдущих пунктах теории является условие  $\delta n \gg 1$ , которое в используемых в этом пункте обозначениях принимает вид  $2(Ed/B)^{1/2}$ . Кроме того, желательно, чтобы выбранную молекулу можно было рассматривать как ротатор (а не волчок) и выполнялись условия, препятствующие возбуждению колебательной степени свободы. Все эти условия выполнимы для тяжелых полярных двухатомных молекул, например для молекулы CsI. Молекула CsI является ротатором и имеет следующие значения параметров:  $B = 708$  МГц ( $2,36 \cdot 10^{-2} \text{ см}^{-1}$ ),  $d = 12,1D$ . Энергия первого колебательного уровня соответствует энергии 71-го вращательного уровня, что накладывает условие  $\delta n < 140$ . Полагая  $E = 3$  кВ/см (10 СГСЕ), имеем значение энергии взаимодействия системы с полем  $Ed = 0,61 \text{ см}^{-1}$  и значение

параметра квазиклассичности  $\delta n = 10$ . Частота внешнего воздействия  $\omega$  предполагается порядка  $\Omega_{ph} = (BE d)^{1/2} = 0,12 \text{ см}^{-1} = 3,5 \text{ GHz}$ . В качестве объекта наблюдения, по-видимому, целесообразно использовать пучок молекул, предварительно охлажденный до энергий, меньших энергии взаимодействия системы с полем, что для рассматриваемого примера дает температуру  $\sim 1 \text{ К}$ . Более подробно "приемлемость" молекул типа CsI для исследования хаотической вращательной динамики обсуждается в работе [31].

Во избежание недоразумений отметим, что мы приводим здесь оценку для двухатомной молекулы только из соображений простоты и ни коим образом не отвергаем возможности использования в качестве объекта для реального эксперимента многоатомную молекулу. Тем более, что условие  $2(Ed/B)^{1/2} \gg 1$  выполнимо для нее при значительно более низкой амплитуде внешнего поля.

**2.9.** Двухатомная молекула под действием ИК поля. В этом пункте мы рассмотрим явление взаимодействия двух КНР в двухатомной молекуле под действием ИК поля [32]. Анализ задачи начнем с классического подхода и ограничимся для вращательной степени свободы молекулы двумерным приближением. При классическом подходе двухатомной молекуле в  $\Sigma$ -состоянии можно сопоставить систему двух точечных масс с потенциалом взаимодействия  $U(r)$ , имеющим минимум при  $r = r_0$ . В переменных действие—угол невозмущенному движению молекулы соответствует гамильтониан  $H_0 = H_0(I, L^2)$ , где величина  $I$  характеризует колебательное движение ядер ( $I = 0$  соответствует отсутствию колебаний), переменная  $L$  совпадает с моментом вращения. Сопряженные переменные к  $I, L$  обозначим соответственно через  $\phi$  и  $\theta$  ( $\theta$  — угол между осью  $x$  и осью молекулы). В дальнейшем ограничимся случаем малых значений  $I, L$  ( $H_0(I, L^2) \equiv E \ll |U(r_0)|$ ). Тогда, разлагая  $H_0$  до квадратичных членов, имеем

$$H_0 = h\Omega n - xh\Omega n^2 + Bl^2, \quad (2.20)$$

$$r = r_0 + (2hn/\Omega M)^{1/2} \cos \phi. \quad (2.21)$$

В (2.20), (2.21) мы перешли к безразмерным действиям  $n = I/h, l = L/h$  и использовали стандартные обозначения для частоты гармонических колебаний  $\Omega = dH_0/dI$ , а в рмонизма  $x = h(d^2H_0/dI^2)/\Omega$ , момента инерции  $B = h^2 dH_0/dL^2$  и приведенной массы  $M$ .

Рассмотрим процесс взаимодействия молекулы с линейно поляризованным полем  $E(t)$  с поляризацией вдоль оси  $x$ . Положим дипольный момент молекулы  $d = e_{\text{eff}} \mathbf{r}$ , где эффективный заряд атомов  $e_{\text{eff}} = d_0/r_0$ . Тогда гамильтониан взаимодействия молекулы с излучением имеет вид  $H_{\text{int}} = -(\mathbf{E}d) = -Ee_{\text{eff}} r \cos \theta \cdot \cos \omega t$ . Подставляя  $r$  из (2.21) и оставляя только члены, ответственные за резонансное взаимодействие, имеем

$$H_{\text{int}} = Wn^{1/2} \cos \theta \cdot \cos(\phi - \omega t), \quad W = -e_{\text{eff}} E (2h/\Omega M)^{1/2}, \quad (2.22)$$

где  $W$  — параметр взаимодействия ИК излучения с молекулой. Если напряженность поля характеризовать интенсивностью излучения, то, например,

для параметров молекулы  $\text{GeO}$  ( $\hbar\Omega = 985,8 \text{ см}^{-1}$ ,  $M = 13,1$  а.е.м.) и интенсивности излучения  $25 \text{ ГВт/см}^2$  имеем  $W = 10,72 \text{ см}^{-1}$ .

Линейно поляризованное поле представим в виде суммы двух циркулярно поляризованных составляющих:  $\cos \theta \cdot \cos(\phi - \omega t) = (1/2) \times [\cos(\phi - \omega t - \theta) + \cos(\phi - \omega t + \theta)]$ . Каждый член в последней формуле приводит к возникновению в системе нелинейного резонанса, который мы рассмотрим несколько более подробно. Рассмотрим член, содержащий фазу  $\phi - \omega t + \theta$ . Произведем каноническую замену переменных  $(n, l) \rightarrow (n, k)$ ,  $(\phi, \theta) \rightarrow (\Theta, \tilde{\Theta})$ , где  $k = l - n$ ,  $\Theta = \phi - \omega t + \theta$  — медленная фаза,  $\tilde{\Theta}$  — сопряженная переменная к  $k$ . Тогда гамильтониан  $H_0 + H_{\text{ин}}$  принимает вид

$$H = \Delta(k)n - \gamma n^2 + Bk^2 + (W/2)n^{1/2} \cos \Theta \equiv H_{\text{eff}}(n, \Theta) + Bk^2, \quad (2.23)$$

$$\Delta(k) = \hbar(\Omega - \omega) + 2Bk, \quad \gamma = x\hbar\Omega - B.$$

Из (2.23) видно, что величина  $k$  является интегралом движения, и, таким образом, задача свелась к анализу одномерной системы с гамильтонианом  $H_{\text{eff}}(n, \Theta)$ , где величина  $k$  играет роль параметра.

Фазовый портрет системы (2.23) был воспроизведен на рис. 3. Как видно из рисунка, при значениях параметра  $\Delta$  выше некоторого критического ( $k = -11$  для выбранных значений параметров) в системе имеют место "главный" нелинейный резонанс и "сопутствующий". Однако при значениях интенсивности излучения меньше  $10^{11} \text{ Вт/см}^2$  реальные размеры сопутствующего резонанса для большинства двухатомных молекул малы, и его влиянием на динамику системы можно пренебречь. В случае захвата системы в главный нелинейный резонанс движение молекулы представляет собой периодические изменения колебательного состояния  $n(t)$  (которые сопровождаются изменением вращательного состояния  $l(t) = n(t) + k$ ) с характерной частотой  $\Omega_{\text{ph}} \sim 10^{12} \text{ с}^{-1}$ . Максимальное и минимальное возможные значения  $n$  при этом определяются положением сепаратрисы главного нелинейного резонанса. Положение сепаратрисы при выбранных значениях параметров системы отражено на рис. 23 штриховыми линиями. На том же рисунке сплошными

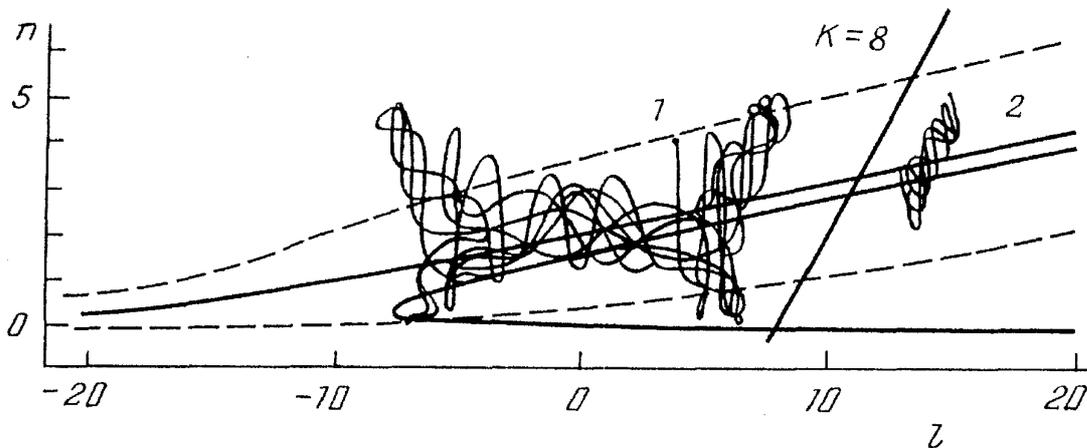


Рис. 23. Примеры хаотической (1) и регулярной (2) траекторий молекулы  $\text{GeO}$  в линейно поляризованном ИК поле высокой интенсивности ( $25 \text{ ГВт/см}^2$ ). Длительность траекторий  $10^{-10}$  и  $10^{-11}$  с соответственно. На рисунке также отражено положение сепаратрисы (пунктирные линии) и центра (верхняя сплошная кривая) главного нелинейного резонанса, обусловленного левополяризованной составляющей внешнего поля. (Из [32])

линиями указано положение центра главного резонанса (верхняя кривая), а также положение гиперболической точки главного резонанса и центра сопутствующего резонанса. Таким образом, область влияния нелинейного резонанса, обусловленного левополяризованной составляющей, ограничена штриховыми линиями на рис. 23. Область влияния нелинейного резонанса, обусловленного правополяризованной составляющей, будет расположена симметрично (относительно оси ординат) приведенной на рисунке. Нетрудно видеть, что нелинейные резонансы имеют общую область влияния в окрестности  $l = 0$ , и согласно ранее изложенному мы ожидаем хаотическую динамику в этой области. В качестве иллюстрации на рис. 23 приведены проекции траектории молекулы GeO для двух начальных условий: 1)  $n(0) = l(0) = 4$ ,  $\Theta(0) = \phi(0) = 0$ ; 2)  $n(0) = 5$ ,  $l(0) = 15$ ,  $\Theta(0) = \phi(0) = 0$ . Видно, что во втором случае величина  $k$  приблизительно сохраняется ( $k \approx 10$ ). Для начальных условий, принадлежащих общей области влияния нелинейных резонансов (случай 1), траектория является хаотической. Длительность траекторий в реальной шкале времени составляет  $10^{-10}$  и  $10^{-11}$  с соответственно.

Перейдем к квантовомеханическому анализу системы. Ограничимся, как и прежде, малыми значениями квантовых чисел  $n$  и  $l$ . Тогда гамильтониан молекулы под действием линейно поляризованного излучения в представлении действие—угол имеет вид

$$\hat{H} = h\Omega(\hat{J} + (1/2) - x\hat{J}^2) + B\hat{I}^2 + [Ed_0 + (W/2)(\hat{J}^{1/2}\exp(i\phi) + \exp(-i\phi)\hat{J}^{1/2})] \cos \theta \cdot \cos \omega t, \quad (2.24)$$

где  $J = -i\partial/\partial\phi$ ,  $I = -i\partial/\partial\theta$ , значение  $W$  определено в формуле (2.22). Будем искать собственные квазиэнергетические решения системы в виде

$$\psi(t) = \exp[-i(\lambda_k t/h + \Omega t/2)] \sum_{n,l} c_{n,l} \exp(in\omega t) |n, l\rangle. \quad (2.25)$$

Подставляя (2.25) в (2.24) и пренебрегая нерезонансными членами, получаем следующее двухиндексное уравнение на собственные значения квазиэнергии:

$$[h(\Omega - \omega)n - xh\Omega n^2 + Bl^2] c_{n,l}^{(k)} + (W/4) \sum_{+,-} [(n+1)^{1/2} c_{n+1,l\mp 1}^{(k)} + n^{1/2} c_{n-1,l\pm 1}^{(k)}] = \lambda_k c_{n,l}^{(k)}. \quad (2.26)$$

При сравнении последней формулы с формулой (2.9) видно, что рассматриваемая система во многом эквивалентна системе двух взаимодействующих резонансов (2.5). В частности, КФ молекулы в случае циркулярно поляризованного поля (в суммах в (2.26) присутствуют по одному члену; первый знак отвечает левополяризованному полю, второй — правополяризованному) и КФ в случае линейно поляризованного поля будут иметь качественное отличие, аналогичное представленному на рис. 18. Это качественное отличие будет проявляться в двух основных эффектах.

Пусть в начальный момент времени система находилась в основном состоянии. Тогда в случае циркулярно (лево) поляризованного поля будут заселяться лишь уровни с  $n = l$ . Для выбранных значений параметров в численном эксперименте происходило возбуждение 6 — 7 колебательно-вращательных уровней, что удовлетворительно согласуется и шириной классического нелинейного резонанса (см. рис. 23). В случае линейно поляризованного

излучения в динамику системы вовлекалось  $\delta n \sim 7 - 8$  уровней по  $n$  и  $\delta l \sim 21 - 25$  уровней по  $l$ , т.е. всего порядка 200 колебательно-вращательных уровней. Таким образом, одним из эффектов перекрытия двух КНР является существенное увеличение числа уровней, вовлеченных в динамику переходов:  $\delta N \sim \delta n \cdot \delta l$ .

Второй эффект связан с числом линий в спектре наведенной поляризации. Представим высокочастотную составляющую поляризации молекулы в виде

$$P_x(t) = p_c^{(x)}(t)\cos \omega t + p_s^{(x)}(t)\sin \omega t, \quad (2.27)$$

$$P_y(t) = p_c^{(y)}(t)\cos \omega t + p_s^{(y)}(t)\sin \omega t,$$

где  $p_c^{(x,y)}(t) = (1/T)\oint \langle \psi(t) | \hat{d}_{x,y} | \psi(t) \rangle \cos \omega t dt$ ,  $T$  — период внешнего поля. Поскольку интенсивность излучения колеблющегося диполя пропорциональна второй производной от поляризации, то частотный спектр величин  $p_{c,s}(t)$  определяет спектральный состав высокочастотного излучения молекулы. Заметим, что в случае начального условия в виде заселения основного состояния в силу симметрии решения имеем для линейно поляризованного поля  $p_{c,s}^{(y)} \equiv 0$ , для циркулярно поляризованного поля  $p_s^{(y)} = -p_c^{(x)}$ ,  $p_c^{(y)} = -p_s^{(x)}$ . На рис. 24 представлен частотный спектр обезразмеренной огибающей  $\tilde{p}_c(t)$

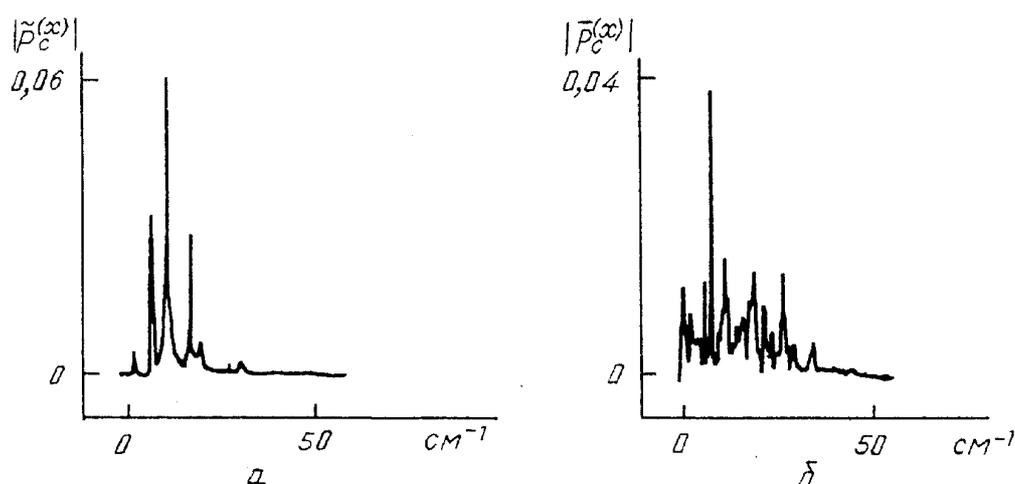


Рис. 24. Частотный спектр огибающей  $\tilde{p}_c^{(x)}(t)$  наведенной поляризации в молекуле GeO в случае циркулярно (а; регулярный режим) и линейно (б; хаотический режим) поляризованного поля. (Из [32])

( $|\tilde{p}_c(t)| \leq 1$ ) в случае линейно (а) и циркулярно (б) поляризованного излучения (спектр  $\tilde{p}_s(t)$  имеет аналогичный вид). Видно, что в регулярном случае спектр состоит из небольшого числа хорошо разрешенных линий. В режиме квантового хаоса спектр является весьма сложным и близок к спектру случайного процесса. Данный эффект полностью аналогичен обсуждавшемуся в п. 2.6 и является следствием двумерной делокализации КФ системы.

В заключение данного пункта остановимся на вопросе о справедливости двумерного приближения. В случае линейно поляризованного поля трехмерная модель обладает дополнительным интегралом движения (проекция момента импульса на направление поляризации поля) и это, как было показано в предыдущем пункте, обеспечивает адекватность двумерной модели реальной

ситуации. Случай циркулярно поляризованного поля для трехмерной модели является более сложным: система не обладает дополнительным глобальным интегралом движения и в общем случае невозможно свести двумерную модель к трехмерной (однако это удастся сделать в некоторых частных случаях [32]). Динамика молекулы в циркулярно поляризованном поле требует дополнительного исследования.

**2.10.** "Вращающаяся" двухуровневая система. В предыдущем пункте было показано, что в случае линейно поляризованного излучения в молекуле возможен режим квантового хаоса. При этом предполагалось выполненным условие, что энергия взаимодействия системы с полем существенно превышает константу ангармонизма  $W > \chi\hbar\Omega$ . Однако для большинства двухатомных молекул выполнение этого условия требует очень высоких интенсивностей лазерного излучения, что представляет собой определенные трудности с экспериментальной точки зрения. В данном пункте показано, что хаотический режим движения может быть получен и при существенно меньших амплитудах внешнего поля  $W < \chi\hbar\Omega$  (однако  $W > B$ ) при условии, что внешнее поле является модулированным с частотой  $\nu$ :  $E(t) = E \cos \nu t \cdot \cos \omega t$ , а несущая частота  $\omega$  находится в резонансе с колебательным переходом (модуляцию можно получить путем использования двух лазеров со слабо отличными частотами). Условие  $W < \chi\hbar\Omega$  позволяет ограничиться при анализе задачи двумя колебательными уровнями. Таким образом, мы приходим к двухуровневой системе с учетом "тонкой структуры уровней", обусловленной вращательной степенью свободы (см. п. 1.7).

Согласно (1.2-2) система уравнений на волновые функции  $\psi_{1,2}(\theta, t)$  для двух колебательных уровней имеет вид

$$i\hbar\partial\psi_2/\partial t = (E_2 - B\partial^2/\partial\theta^2)\psi_2 - dE(t)\cos\omega t \cdot \cos\theta \cdot \psi_1, \quad (2.28)$$

$$i\hbar\partial\psi_1/\partial t = (E_1 - B\partial^2/\partial\theta^2)\psi_1 - dE(t)\cos\omega t \cdot \cos\theta \cdot \psi_2,$$

где  $E(t) = E \cos \nu t$ ,  $d$  — значение матричного элемента перехода. Введем функцию  $\Phi(\theta, t) = \exp(i\omega t)\psi_2(\theta, t) + \psi_1(\theta, t)$ , тогда в резонансном приближении (в приближении вращающейся волны) и при условии точного резонанса  $E_2 - E_1 = \hbar\omega$  для  $\Phi(\theta, t)$  получаем следующее уравнение:

$$i\hbar\partial\Phi/\partial t = \hat{H}_{\text{eff}}\Phi, \quad \hat{H}_{\text{eff}} = -B\partial^2/\partial\theta^2 - (Ed/2)\cos\theta \cdot \cos\nu t, \quad (2.29)$$

которое полностью эквивалентно уравнению Шрёдингера для системы двух взаимодействующих КНР (модели молекулы в СВЧ поле). Отсутствие модуляции соответствует изолированному КНР. Функция  $\Phi(\theta, t)$  полностью описывает динамику рассматриваемой системы. В частности, для значения наведенной поляризации имеем

$$P(t) = d(p_c(t)\cos\omega t + p_s(t)\sin\omega t), \quad (2.30)$$

$$p_c(t) = (1/2)\sum_l (b_{l+1}^* b_l + \text{к.с.}),$$

$$p_s(t) = (1/2i)\sum_{l \text{ четное}} (b_{l+1}^* b_l + b_{l+1}^* b_l),$$

где  $b_\lambda(t)$  — коэффициенты фурье-разложения  $\Phi(\theta, t)$ . Прежде чем перейти к сравнительному анализу поведения огибающих в случае регулярной ( $\nu = 0$ ) и хаотической ( $\nu \neq 0, K > 1$ ) динамики системы, заметим, что характерные частоты  $p_c(t)$  и  $p_s(t)$  могут отличаться на несколько порядков. Действительно, как видно из (2.30),  $p_c(t)$  соответствует поляризации системы с эффективным гамильтонианом (2.29):  $p_c(t) = \langle \Phi | \cos \theta | \Phi \rangle$ . Таким образом, согласно результатам п. 1.3, характерная частота  $p_c(t)$  определяется частотой фазовых колебаний  $\Omega_{ph} = (BEd)^{1/2}/\hbar$ . Данная частота соответствует медленным движениям системы по вращательной степени свободы. С другой стороны, характерная частота  $p_s(t)$  определяется частотой Раби:  $\Omega_R = Ed/h$ . Данный факт связан с тем, что огибающая при  $\sin \omega t$  определяет закон поглощения энергии системы (2.28). (Энергия системы пропорциональна населенности верхнего уровня. График населенности верхнего уровня при хаотическом и регулярном режимах движения представлен на рис. 25.) Таким образом,  $p_s(t)$  отражает быстрые

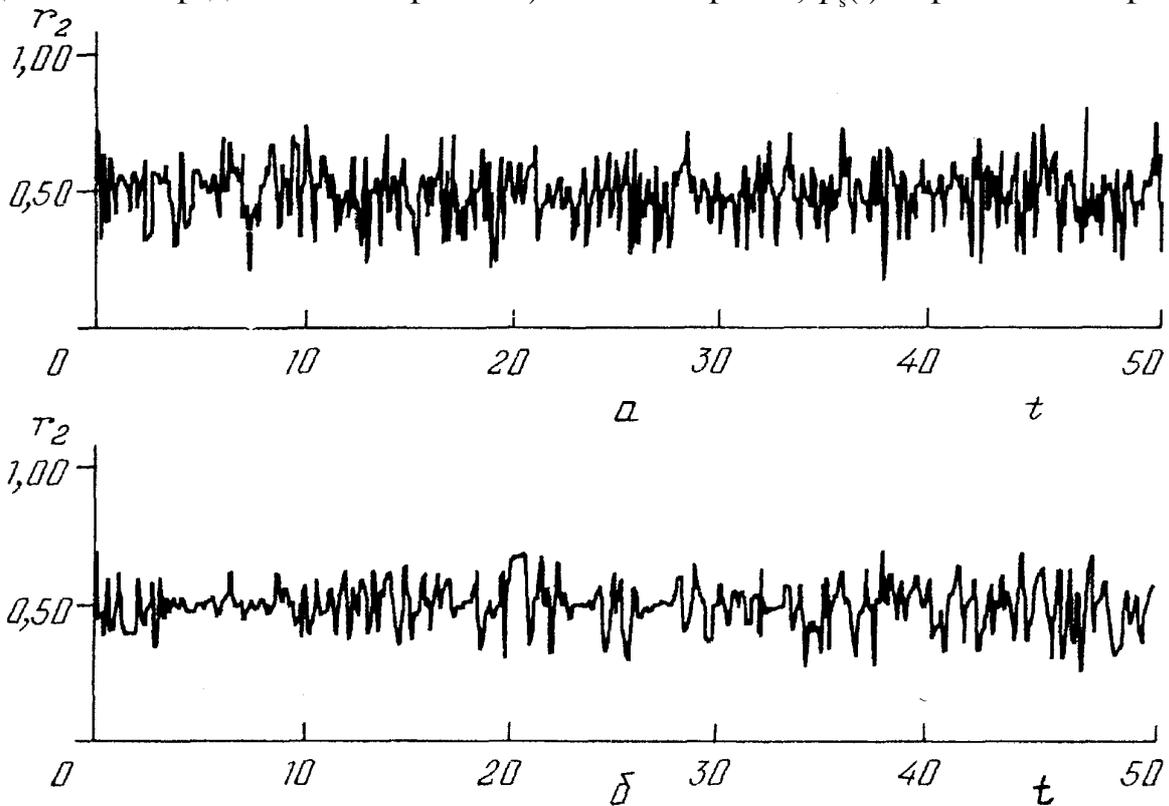


Рис. 25. Населенность верхнего колебательного уровня системы (2.28) в случае регулярного (а) и хаотического (б) режима. Значение параметров как для рис. 26

движения системы по колебательной степени свободы. Поскольку мы рассматриваем случай  $\delta n = 2(Ed/B)^{1/2} \gg 1$ , то

$$\Omega_R = Ed/h = \Omega_{ph} \delta n / 2 \gg \Omega_{ph} \quad (\Omega_{ph} = (BEd)^{1/2}/h).$$

Как уже отмечалось в п. 2.6, основным проявлением хаоса в системе (2.29) является "сложность" частотного спектра квантовомеханических средних. Спектр огибающей  $p_c(t)$  в случае регулярной ( $\nu = 0$ ) и хаотической ( $\nu = 0,3, K = 4,71$ ) динамики был представлен на рис. 19. На рис. 26 представлен спектр огибающей  $p_s(t)$ . Как видно из сравнения рис. 19 и 26, для  $p_s(t)$  качественное различие между регулярным и хаотическим режимами зна-

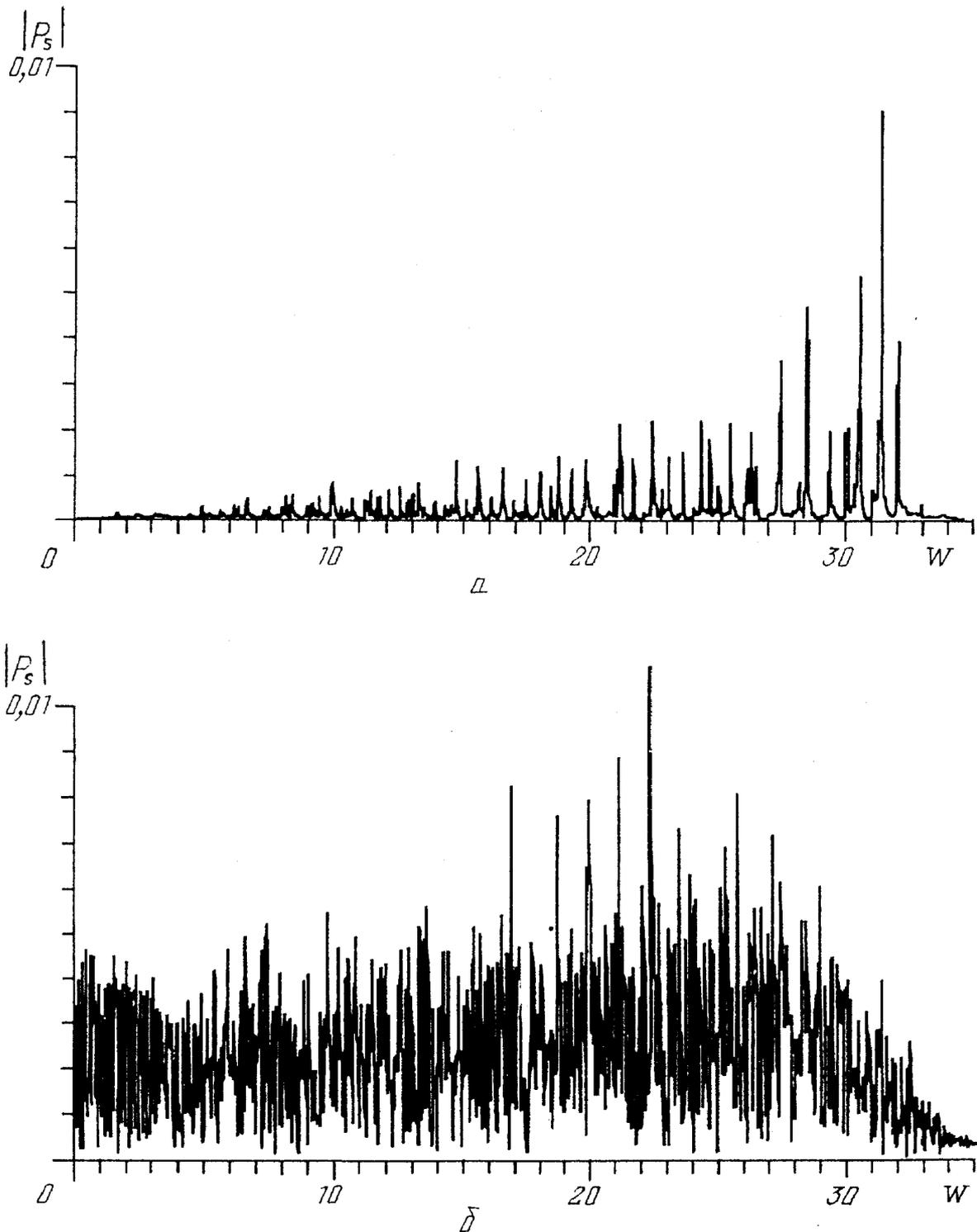


Рис. 26. Спектр огибающей  $p_s(t)$  для системы (2.28) в случае регулярной (а) и хаотической (б) динамики системы. (Спектр  $p_c(t)$  представлен на рис. 19.) Значения параметров:  $\gamma = 2B/K^2 = 1$ ,  $V = -Ed/2 = 1$ , а:  $\nu = 0$ , б:  $\nu = 0,3$ . Время усреднения  $T = 210$ . (Из [11])

чительно сильнее. Если в регулярном случае спектр  $p_s(w)$  состоит из относительно небольшого числа линий и обладает характерной структурой спектра квазипериодического процесса, то в хаотическом случае спектр  $p_s(w)$  близок к спектру случайного процесса. То, что для анализируемой системы при  $K > 1$  процесс  $p_s(t)$  можно рассматривать как случайный, подтверждает также поведение автокорреляционной функции  $R(\tau) = \overline{p_s(t + \tau)p_s(t)}$  (рис. 27).

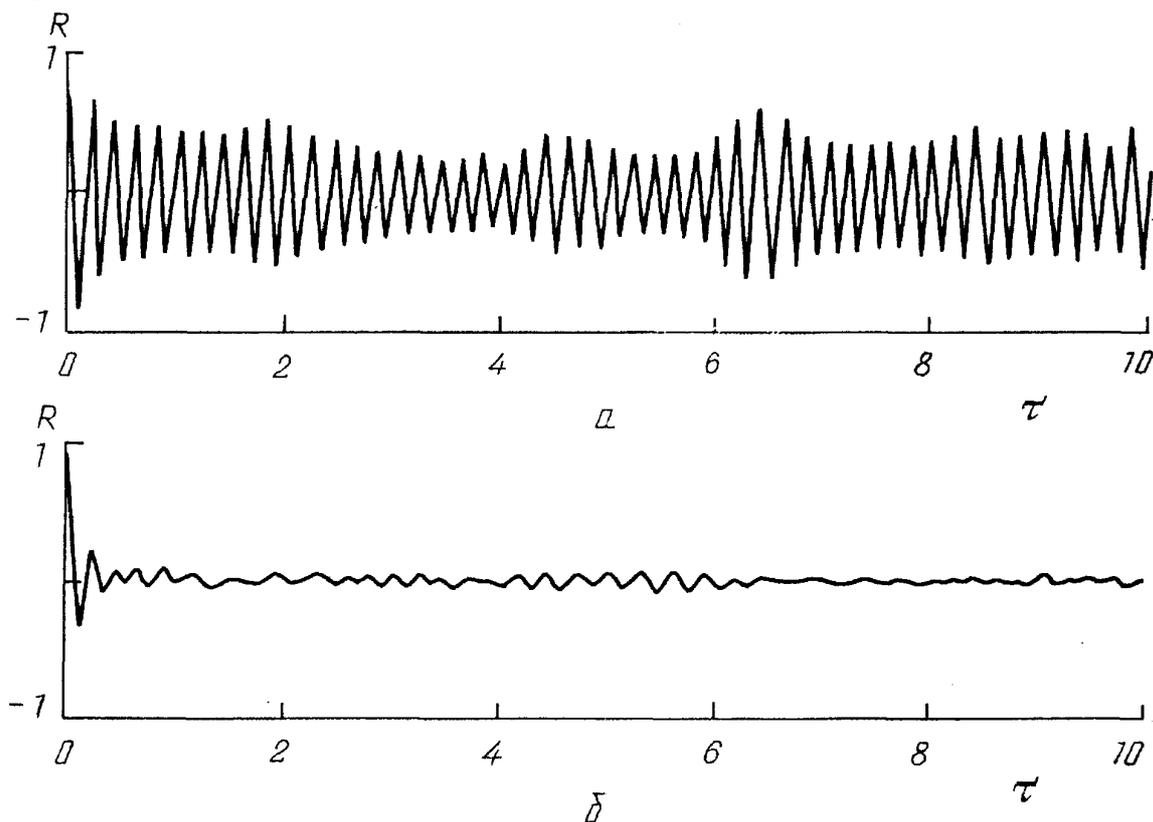


Рис. 27. Автокорреляционная функция процесса  $p_s(t)$ . Параметры прежние. (Из [11])

Рассмотренная в данном пункте система представляется, на наш взгляд, наиболее приемлемым объектом для экспериментального исследования квантового хаоса в системах с ограниченным объемом хаотической компоненты. По сравнению с двухатомной молекулой (п. 2.9) здесь, во-первых, требуется значительно меньшая интенсивность внешнего поля, и, во-вторых, данная система позволяет рассматривать как хаотический, так и регулярный режимы движения. Преимущество ПС сравнению с дипольной молекулой в СВЧ поле заключается в том, что вместо (или помимо)  $p_c(t)$  мы можем анализировать другую характеристику —  $p_s(t)$ . Преимущество измерения величины  $p_s(t)$  состоит в том, что при увеличении амплитуды  $E$  внешнего поля частотный интервал  $p_s(\omega)$  растет пропорционально  $E$  (а не как  $E^{1/2}$  в случае  $p_c(\omega)$ ). Поэтому проблема разрешения частотных линий для исследования зависимости (2.12) значительно упрощается.

### Заключение

В данной работе мы рассмотрели с классических и квантовых позиций динамику изолированного нелинейного резонанса и системы двух взаимодействующих резонансов. Последняя система при классическом рассмотрении проявляет хаотический режим движения, что и обуславливает интерес к динамике этой системы в квантовом случае. Как отмечалось выше, данная система является представителем класса систем с ограниченным объемом хаотической компоненты и этим принципиально отличается от наиболее исследованных к настоящему времени моделей квантового хаоса — квантового ротатора под действием периодической последовательности  $\delta$ -импульсов и атома водорода в СВЧ поле (см. [2] и приведенные там ссылки). (В последних системах в классическом пределе возможно явление диффузии, и усилия авторов направлены в основном на объяснение особенностей диффузии в квантовом случае.)

Вопросы, которые затрагиваются в данном обзоре, можно условно объединить в три основные группы: 1) сравнение классической и квантовой динамики рассматриваемых систем; 2) основные проявления хаоса при квантовом подходе; 3) применение теории к анализу конкретнейших физических объектов. Начнем с последнего пункта. Мы рассмотрели явление КНР и взаимодействия КНР, которые возникают в молекулах под действием СВЧ и ИК полей высокой интенсивности (не ниже  $1 \text{ МВт/см}^2$ ). Конечно же, этими системами не исчерпываются все системы, в которых возможен КНР и взаимодействие КНРов. Мы ограничились анализом выбранных систем, поскольку для них явление КНР и взаимодействия двух КНР проявляется в наиболее "эталонном" виде.

Вопрос об основных проявлениях хаоса в квантовом случае следует разбить на две части. Это "теоретические" проявления хаоса, которые включают в себя общий анализ решения уравнения Шрёдингера, структуры КФ и т.д., и "практические" проявления хаоса, т.е. такие проявления, которые могут быть зарегистрированы экспериментально. Проводя аналогию с динамическими системами с неограниченной хаотической компонентой фазового пространства, можно дать краткий ответ на поставленный вопрос следующим образом. Для последних систем основным теоретическим проявлением хаоса является относительная (по сравнению с регулярным случаем) делокализация КФ, практическим — явление диффузии с последующим насыщением за счет квантовых эффектов. Для рассматриваемых в данной работе систем с ограниченной хаотической компонентой (в которых явление диффузии фактически отсутствует) основным теоретическим проявлением хаоса является двумерная делокализация КФ, практическим — "сложность" спектра собственного излучения системы. Это, в частности, проявляется в разных законах роста числа линий с ростом значения параметра квазиклассичности (с ростом амплитуды внешнего поля) для регулярного и хаотического режимов движения и квазислучайностью поведения квантово-механических средних. Отметим, что в этом смысле динамика квантовой системы является "более случайной", чем динамика классической системы, поскольку динамика классических средних (как было показано в п. 2.2) представляет собой периодический процесс.

Что касается последнего вопроса о соответствии между классической динамикой и квантовой, то для рассматриваемых здесь систем этот вопрос является слишком сложным, чтобы дать на него исчерпывающий ответ на настоящий момент времени. Поэтому в теоретическом плане мы ограничились лишь более четкой формулировкой проблемы для дальнейшего исследования. Однако представленные численные расчеты динамики системы КНР могут быть полезны в практическом плане, поскольку позволяют указать конкретные значения параметров, при которых динамика системы (например, молекулы в СВЧ поле) близка к классической и может быть использован аппарат классической механики. Отметим также, что мы обсуждали вопрос о соответствии лишь применительно к наблюдаемым величинам и оставили в стороне анализ структуры фазового пространства квантовой системы (т.е. анализ волновой функции в Husimi-представлении или в представлении когерентных состояний) как ненаблюдаемой, по крайней мере на сегодняшний день, характеристики системы.

Наконец, хотелось бы остановиться еще на одном вопросе, который мы до сих пор не затрагивали в работе. Это вопрос об учете влияния процессов релаксации. Учет процессов релаксации для рассматриваемых систем представляет собой чрезвычайно сложную и в то же время важную проблему.

Сложность обусловлена большим числом уровней (до нескольких сотен), участвующих в динамике системы, что требует привлечения нетрадиционных подходов и методов анализа. (В приложении III мы обсуждаем один из таких возможных методов). Кроме того, предварительные исследования модельных квазиклассических систем показывают, что диссипация в определенном смысле восстанавливает в динамике квантового объекта классические черты [33 — 36], т.е. динамика квантовой системы с диссипацией более близка к классической, чем в отсутствие диссипации. Поэтому вопрос об учете влияния процессов релаксации на динамику многоуровневых квантовых систем интересен и с фундаментальной точки зрения соответствия классической и квантовой механик. Мы надеемся вернуться к этой проблеме в будущем.

### Приложения

^ I. Воспользуемся аналогией между гамильтонианом КНР при  $\Delta = 0$  ( $H_{\text{eff}} = -(\gamma\hbar^2/2)\partial^2/\partial\Theta^2 + V \cos \Theta$ ) и гамильтонианом частицы с массой  $\gamma^{-1}$  в периодическом потенциале  $V \cos \Theta$ . Тогда физическая причина отсутствия резкой границы перехода от колебательного режима к вращательному заключается в эффекте туннелирования. Будучи экспоненциально малым для низких значений энергии, эффект туннелирования становится заметным при приближении  $\lambda_k$  к значению энергии на сепаратрисе. В этом случае соответствующие значениям  $\lambda_k$  ( $\lambda_{\min} < \lambda_k < V$ ) собственные функции нельзя рассматривать как волновые функции колебаний частицы в изолированной потенциальной яме. Аналогично, при приближении к сепаратрисе сверху эффект отражения над ямой приводит к расщеплению уровней  $\lambda_{2k}$  и  $\lambda_{2k+1}$ , которое становится заметным при  $\lambda < \lambda_{\max}$ . Для количественной характеристики ширины переходной области  $\lambda_{\min} < \lambda < \lambda_{\max}$  будем предполагать  $\lambda_{\max}$  равным такому значению, начиная с которого величина расщепления уровней не превышает наперед заданного малого числа  $\epsilon$  (величина  $\epsilon$  может определяться степенью точности наблюдения  $\epsilon \sim \hbar/t$ ). Заметим, что расщепление уровней  $\lambda_{2k}$  и  $\lambda_{2k+1}$  совпадает со значением ширины запрещенной зоны для частицы в периодическом потенциале. Аналогичным образом в качестве значения  $\lambda_{\min}$  примем значение, ниже которого ширина разрешенных зон (как известно, ширина разрешенной зоны определяется величиной эффекта туннелирования) не превышает значения  $\epsilon$ .

Оценим значение  $\lambda_{\min}$ . Как известно, относительная ширина разрешенных зон определяется величиной  $2D^{1/2}/\pi$  ( $D \ll 1$ ), где  $D$  — коэффициент проницаемости потенциального барьера, разделяющего две потенциальные ямы потенциала  $V \cos \Theta$ :

$$D = \exp\left\{-\frac{8}{\hbar} \int_0^{\theta} [(V \cos \Theta - \lambda)/\gamma]^{1/2} d\Theta\right\}, \quad \theta = \arccos(V/\lambda). \quad (1.1)$$

Поскольку мы полагаем  $\lambda$  близким к  $V$ , то интеграл в (1.1) приближенно равен  $(\pi/2)(V/\gamma)^{1/2} [1 - (\lambda/V)]$ . Полагая  $\epsilon = 2D^{1/2}/\pi$ , получаем

$$1 - \lambda_{\min}/V \sim |\ln \epsilon|/\delta n. \quad (1.2)$$

Оценим число уровней  $\Delta k$ , попавших в переходную область  $\lambda_{\min} < \lambda < V$ . Воспользуемся квазиклассическим правилом квантования, тогда

$$\Delta k \approx h^{-1} \int_{\lambda_{\min}}^V d\lambda / \Omega(\lambda). \quad (I.3)$$

Подставляя в (I.3) значение  $\Omega(\lambda)$  [3]

$$\Omega^{-1}(\lambda) = 2 \ln [4\sqrt{2}(1 - \lambda/V)^{-1/2}] / \pi(V\gamma)^{1/2}, \quad (I.4)$$

имеем

$$\Delta k = |\ln \varepsilon| [\ln(32\delta n / |\ln \varepsilon|) + 1/2] / 8 \sim \ln(\delta n). \quad (I.5)$$

Оценка  $\lambda_{\max}$  и числа уровней, попадающих в переходную область  $V < \lambda < \lambda_{\max}$ , может быть проведена аналогичным образом.

II. Подставляя (1.23) в уравнение Шрёдингера с гамильтонианом (1.22) и используя резонансное приближение, получаем следующее уравнение на собственные значения квазиэнергий  $\lambda$ :

$$(\Delta\omega\delta_{\alpha,2} + Bl^2)b_{l,\alpha} - (Ed/4)(b_{l+1,\beta} + b_{l-1,\beta}) = \lambda b_{l,\alpha}; \quad (II.1)$$

здесь  $b_{l,\alpha}$  — коэффициенты фурье-разложения  $\phi_\alpha(\theta)$ . Определим вектор  $\mathbf{a}$  следующим образом:

$$a_l = b_{l,1}, \quad l \text{ четное}; \quad a_l = b_{l,2}, \quad l \text{ нечетное}. \quad (II.2)$$

Тогда уравнение (II.1) принимает вид

$$[\Delta\omega \cdot \chi(l) + Bl^2]a_l - (Ed/4)(a_{l+1} + a_{l-1}) = \lambda a_l, \quad (II.3)$$

где  $\chi(l) = 0$ ,  $l$  четное,  $\chi(l) = 1$ ,  $l$  нечетное. Заметим что уравнение (II.3) позволяет определить лишь половину КФ. Вторая половина КФ отвечает другой симметрии и соответствует выбору вектора  $\mathbf{a}$  в виде

$$a_l = b_{l,2}, \quad l \text{ четное}; \quad a_l = b_{l,1}, \quad l \text{ нечетное}. \quad (II.4)$$

В этом случае мы снова приходим к уравнению (II.3), где  $\chi(l)$  переопределено согласно правилу:  $\chi(l) = 0$  при  $l$  нечетном,  $\chi(l) = 1$  при  $l$  четном.

Перейдем к анализу уравнения (II.3). Получим из этого точного уравнения на все компоненты вектора  $\mathbf{a}$  приближенное уравнение на четные компоненты. Для нечетных компонент используем тождество

$$a_l = Ed(a_{l+1} + a_{l-1}) / 4(\lambda - h\Delta\omega - Bl^2). \quad (II.5)$$

Подставляя в (II.3), имеем

$$Bl^2 a_l + (Ed/4)^2 \left[ \frac{a_{l+2} + a_l}{\lambda - h\Delta\omega - B(l+1)^2} + \frac{a_l + a_{l-2}}{\lambda - h\Delta\omega - B(l-1)^2} \right] = \lambda a_l. \quad (II.6)$$

Полагая приближенно  $(l+1)^2 \approx (l-1)^2 \approx l^2$  и вводя производящую функцию  $\Phi(\theta) = (2\pi)^{-1/2} \sum a_l \exp(i l \theta)$ , получаем

$$[\lambda - B\partial^2 / \partial\theta^2 + h\Delta\omega/2]^2 \Phi(\theta) = [(Ed/2)^2 \cos^2\theta + (h\Delta\omega/2)^2] \Phi(\theta). \quad (II.7)$$

Заметим, что если вектор  $\mathbf{a}$  определить согласно формуле (II.4), то уравнение на функцию  $\Phi(\theta)$  в используемом приближении будет иметь тот же вид. Таким образом, (II.7) определяет полный набор КФ.

Мы интересуемся случаем, когда амплитуда внешнего поля достаточно велика. В этом случае решение (II.7) можно искать в квазиклассическом приближении

$$\Phi(\theta) \sim \exp[i\hbar^{-1} \int I(\theta, \lambda) d\theta], \quad (\text{II.8})$$

где  $I(\theta, \lambda) = [\lambda - U_{1,2}(\theta)]^{1/2}$ ,  $U_{1,2}(\theta) = \hbar\Delta\omega/2 \pm [(Ed/2)^2 \cos^2\theta + (\hbar\Delta\omega/2)^2]^{1/2}$ . Собственные значения  $\lambda$  отвечают квантованным значениям действия  $J(\lambda) = (2\pi)^{-1/2} \oint I(\theta, \lambda) d\theta$ . Наконец, заметим, что при квазиклассическом подходе собственные функции уравнения (II.7) совпадают с собственными функциями эффективных гамильтонианов (1.24). Тем самым окончательный ответ можно сформулировать в упрощенной форме, как это и сделано в п. 1.7.

**III. Учет процессов релаксации.** В этом пункте мы рассмотрим динамику обсуждаемых квантовых систем в присутствии сильных процессов релаксации. Условие сильной релаксации означает, что стационарный отклик системы на периодическое воздействие также представляет собой периодический процесс с той же частотой (при умеренной диссипации в классической (и квантовой [33]) системе возможен более сложный режим движения, обусловленный возникновением в системе странного аттрактора). В частности, наведенная поляризация системы при  $t \rightarrow \infty$  может быть представлена в виде ряда Фурье

$$P(t) = d \sum_k [\chi_k^c \cos(k\omega t) + \chi_k^s \sin(k\omega t)], \quad (\text{III.1})$$

где  $\omega$  — частота внешнего поля. Таким образом, в случае сильной диссипации задача сводится к исследованию зависимости восприимчивостей  $\chi_k^{c,s}$  от параметров системы.

Далее анализ проводится в рамках следующей модели. Мы предполагаем, что динамика системы описывается матрицей плотности  $\hat{\rho}(t)$ , которая подчиняется уравнению

$$i\hbar \partial \hat{\rho} / \partial t = [\hat{H}, \hat{\rho}] + \Gamma(\hat{\rho}), \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}(t), \quad (\text{III.2})$$

$$\Gamma(\hat{\rho}) = -i\eta(\hat{\rho} - \hat{\rho}_0), \quad \hat{\rho}_0 \sim \exp(-\hat{H}_0/k_B T) \quad (\text{III.3})$$

( $\eta$  — скорость релаксации в равновесное состояние  $\hat{\rho}_0$ ). Мы выбрали простейший вид для релаксационного члена, поскольку для данного  $\Gamma(\hat{\rho})$  решение (III.2) может быть найдено точно [37]. Конечно, существует вопрос о корректности данного вида релаксационного члена, особенно при больших величинах внешнего поля. Однако здесь мы не будем обсуждать степень применимости данной модели и предполагаем, что (III.2), (III.3), по крайней мере качественно, правильно описывает динамику квантовой системы с учетом влияния термостата (например, молекулы в равновесной среде буферного газа) при произвольных значениях амплитуды внешнего поля.

Согласно [37] установившийся режим движения описывается в рамках

модели (III.2), (III.3) матрицей плотности

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0 + \sum_{k,l} r_{k,l} \hat{R}^{(k,l)}(t), \quad (\text{III.4})$$

$$r_{k,l}(t) = \exp[i(\lambda_l - \lambda_k)th^{-1} - \eta t] \times \quad (\text{III.5})$$

$$\times (1/i) \int dt \text{Tr}\{[\hat{H}_{\text{int}}(t), \hat{\rho}_0] \hat{R}^{(k,l)}(t)\} \exp[-i(\lambda_l - \lambda_k)th^{-1} + \eta t].$$

В (III.4) мы ввели понятие квазиэнергетической матрицы системы. В координатном представлении  $\hat{R}^{(k,l)}(x', x|t) = \psi_k(x', t)\psi_l^*(x, t)$ , где  $\psi_k(x, t)$  — КФ гамильтониана  $\hat{H}$ , отвечающая значению квазиэнергии  $\lambda_k$ ,  $x$  — совокупность координат системы. Заметим, что коэффициенты  $r_{k,l}$  и матрицы  $\hat{R}^{(k,l)}$  являются периодическими функциями времени и, таким образом, для поляризации системы ( $P(t) = \text{Tr}(\hat{d}\hat{\rho})$ ,  $\hat{d}$  — оператор дипольного момента) справедливо разложение (III.1). Из (III.4), (III.5) следует, что свойства матрицы плотности  $\hat{\rho}(t)$  определяются свойствами КФ и КС системы. Ниже представлены результаты расчета восприимчивости для модели колебательной степени свободы молекулы в ИК поле (см. п. 1.2)

$$\begin{aligned} \hat{H} = h\Omega(\hat{a}^+\hat{a} + 1/2) - \\ - \gamma h^2(\hat{a}^+\hat{a})^2 - (Ed/2)[\hat{a}^+ \exp(-i\omega t) + \hat{a} \exp(i\omega t)] \end{aligned} \quad (\text{III.6})$$

и модели вращательной степени молекулы в СВЧ поле (п. 2.3)

$$\hat{H} = -(\gamma h^2/2)\partial^2/\partial\theta^2 - Ed \cos \theta \cdot \cos \omega t, \quad (\text{III.7})$$

структура КФ которых подробно обсуждалась в обзоре.

Используя свойства КФ полностью интегрируемой системы (III.6), можно показать, что в формуле (III.1) только  $\chi_1^{\text{c,s}}$  отличны от нуля. В частности,  $\chi_1^{\text{s}}$ , которая определяет форму линии поглощения системы, находится по формуле

$$\chi_1^{\text{s}} = (Ed/2h) \sum_{l>k} f_{k,l}(T) \tilde{f}_{k,l} \{ \eta / [(\lambda_l - \lambda_k)^2/h^2 + \eta^2] \}, \quad (\text{III.8})$$

$$f_{k,l}(T) = \sum_n n^{1/2} (\rho_n^{(0)} - \rho_{n-1}^{(0)}) (R_{n-1,n}^{(k,l)} - R_{n,n-1}^{(k,l)}),$$

$$\tilde{f}_{k,l} = \sum_n n^{1/2} (R_{n-1,n}^{(k,l)} - R_{n,n-1}^{(k,l)}),$$

где  $R_{n,m}^{(k,l)}$  — элементы квазиэнергетической матрицы. Удобно обезразмерить значения квазиэнергии на величину нелинейности  $\gamma$ . Тогда из (III.8), (III.6) следует, что  $\chi_1^{\text{s}}$  является функцией только безразмерной величины возмущения  $W = -Ed/\gamma h^2$ , безразмерной отстройки  $\Delta = (\Omega - \omega)/\gamma h$  и безразмерной скорости релаксации  $\tilde{\eta} = \eta/\gamma h$ . График  $\chi_1^{\text{s}}(W, \Delta)$  как функции  $\Delta$  представлен на рис. 28 для двух значений параметра  $W$ : 1)  $W = 0,1$ ; 2)  $W = 10$ .

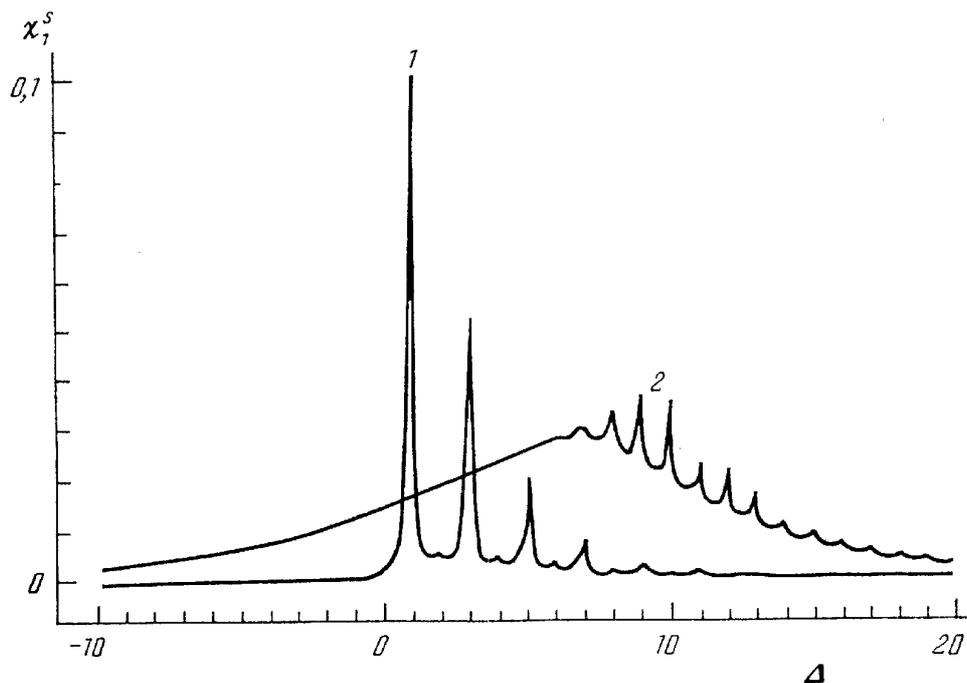


Рис. 28. Форма линии поглощения для модели колебательной степени свободы молекулы (III.6):  $\Delta = (\Omega - \omega)/\gamma\hbar$  — безразмерная отстройка. Значение безразмерного параметра возмущения  $W = -Ed/\gamma\hbar^2$ ; 1:  $W = 0,1$ , 2:  $W = 10$ . Параметры термостата:  $\tilde{\eta} = \eta/\gamma\hbar = 0,1$ ,  $\hbar\Omega/k_B T = 1$ . (Из [37])

Рис. 28,а носит тестовый характер, пики соответствуют переходам  $0 \rightarrow 1$ ,  $1 \rightarrow 2$  и т.д., ширина пиков определяется значением  $\tilde{\eta}$ , которое выбрано равным  $0,1$ . Характерную форму линии КНР отражает случай (2). Вид линии поглощения находит объяснение на основе свойств КФ и КС квантового нелинейного резонанса. Спектр квазиэнергий системы (III.6) представлен на рис. 29 (значение квазиэнергий отложено в единицах  $\gamma\hbar^2$ ). Несколько первых линий с практически равным расщеплением соответствуют КФ "центра" КНР. Степень делокализации этих КФ определяется шириной КНР, расстояние между уровнями квазиэнергий — фазовой частотой КНР. Эти состояния формируют широкую гладкую кривую (см. рис. 28,2) с характерной шириной в размерных переменных порядка  $\gamma\hbar\delta n \approx \Omega_{ph}$ . Квазипересечениям линий на

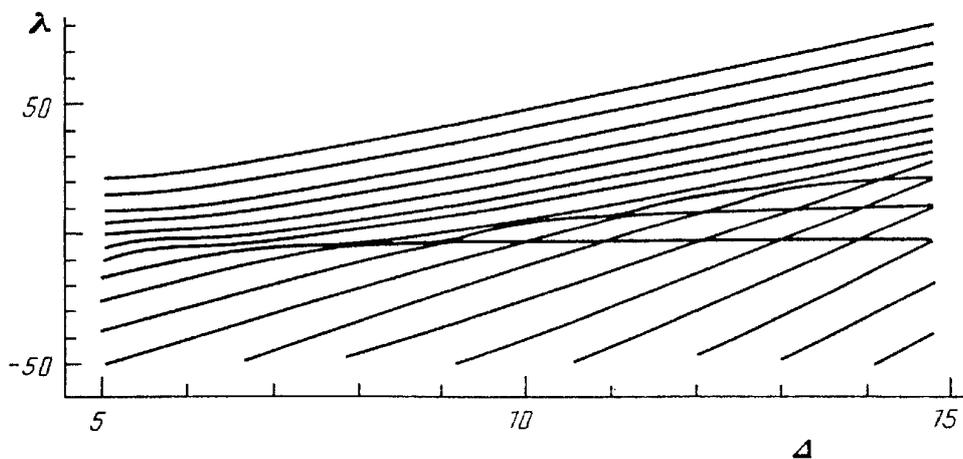


Рис. 29. Спектр квазиэнергий системы (III.6) при  $W = 10$  как функция  $\Delta$ . Величина расщепления нескольких первых уровней определяется значением фазовой частоты КНР. (Из [37])

рис. 29 соответствуют одно-, двух- и т.д. фотонные резонансы. Эти квази-энергетические состояния определяют резонансные пики на правом склоне линии. С увеличением интенсивности внешнего поля относительная высота пиков уменьшается. В заключение этого абзаца отметим, что в отличие от чисто квантового случая  $W=0,1$  (кривая на рис. 28,а), ширина линии КНР не зависит от значения  $\eta$ , если  $\eta < \Omega_{ph}$ .

Перейдем к обсуждению системы (III.7). Как уже неоднократно отмечалось, основным качественным отличием КФ неинтегрируемой системы от интегрируемой является свойство двумерной делокализации (см. п. 2.5). При-

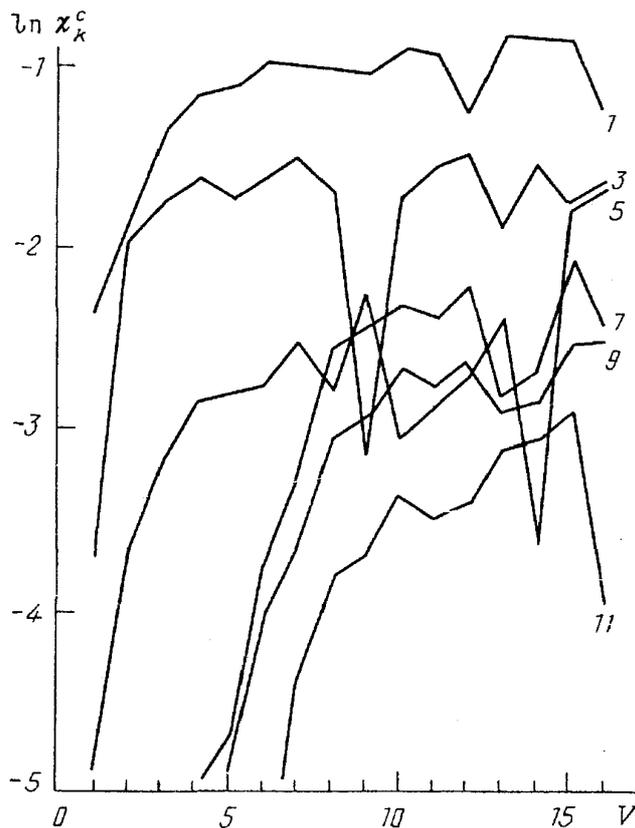


Рис. 30. Значение коэффициентов  $\chi_k^c$  для системы (III.7) как функция величины возмущения  $V = -Ed/h$ . Значения параметров:  $\gamma\hbar = 1$ ,  $\omega = 2$ ,  $\eta = 0,1$ ,  $k_B T = 0,5$ . (Из [28].)  $k = 1, 3, 5, 7, 9, 11$

менительно к рассматриваемой в этом пункте задаче это свойство находит свое отражение в аномально большом числе эффективно отличных от нуля членов в формуле (III.1). Это число приближенно определяется степенью делокализации КФ вдоль оси  $m$ . На рис. 30 представлены результаты численного расчета  $\chi_k^c$  при следующих значениях параметров системы (III.7):  $\gamma\hbar = 1$ ,  $\omega = 2$ ,  $1 < V < 16$  ( $V = Ed/h$ ) и параметрах термостата:  $\eta = 0,1$ ,  $k_B T = 0,5$ . При варьировании  $V$  в выбранном интервале параметр перекрытия резонансов  $K$  (2.2) меняется в пределах  $K = 0,7 - 2,8$ . Из рис. 30 видно, что при  $K > 1$  ( $V > 2$ ) генерируется большое число гармоник (в силу симметричных свойств четные гармоники отсутствуют). Также видно, что понятие числа гармоник хорошо определено.

Генерация большого числа гармоник, по-видимому, является одним из наиболее ярких проявлений квантового хаоса. Можно предложить следующую схему эксперимента для проверки данного эффекта. Мы фиксируем амплитуду внешнего поля на значении, обеспечивающем выполнение условия квазиклассичности  $\delta n \gg 1$ , и варьруем частоту, чтобы изменять параметр стохастичности  $K$ . При  $K \ll 1$  мы будем наблюдать генерацию только первой гармоники. При уменьшении частоты поля мы ожидаем при  $K \approx 1$  быстрый рост числа генерируемых гармоник. Максимальное число гармоник следует ожидать при  $K \approx 4,5$ . Это значение  $K$  соответствует "наиболее хаотическому" режиму, если мы рассматриваем систему (III.7) с точки зрения классической механики, и соответственно наибольшей степени двумерной делокализации КФ в квантово-механическом случае.

менительно к рассматриваемой в этом пункте задаче это свойство находит свое отражение в аномально большом числе эффективно отличных от нуля членов в формуле (III.1). Это число приближенно определяется степенью делокализации КФ вдоль оси  $m$ . На рис. 30 представлены результаты численного расчета  $\chi_k^c$  при следующих значениях параметров системы (III.7):  $\gamma\hbar = 1$ ,  $\omega = 2$ ,  $1 < V < 16$  ( $V = Ed/h$ ) и параметрах термостата:  $\eta = 0,1$ ,  $k_B T = 0,5$ . При варьировании  $V$  в выбранном интервале параметр перекрытия резонансов  $K$  (2.2) меняется в пределах  $K = 0,7 - 2,8$ . Из рис. 30 видно, что при  $K > 1$  ( $V > 2$ ) генерируется большое число гармоник (в силу симметричных свойств четные гармоники отсутствуют). Также видно, что понятие числа гармоник хорошо определено.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] *Елютин П.В.*//УФН. 1988. Т. 155. С. 397.  
 2. *Casati G., Chirikov B.V., Guarneri I., Shepelyansky D.L.*// Phys. Rep. 1987. V. 154. P. 78.  
 3. *Лихтенберг А.Дж., Либман М.А.* Регулярная и хаотическая динамика. — М.: Мир, 1985.  
 4. *Заславский Г.М., Сагдеев Р.З.* Введение в нелинейную физику. — М.: Наука, 1988.  
 5. *Chirikov B.V.*//Phys. Rep. 1979. V. 52. P. 263.  
 6. *Berman G.P., Zaslavsky G.M.*//Phys. Lett. 1979. V. A61. P. 295.  
 7. *Шуряк Э.В.*// ЖЭТФ. 1976. Т. 71. С. 2039.  
 8. *Созонов В.Н.*//ТМФ. 1978. Т. 35. С. 361.  
 9. *Соколов В.В.* Препринт ИЯФ-7850. — Новосибирск, 1978.  
 10. *Берман Г.П., Заславский Г.М., Коловский А.Р.*// ЖЭТФ. 1981. Т. 81. С. 506.  
 [11] *Kolovsky A.R.*//Phys. Lett. 1991. V. 157. P. 474.  
 12. *Berman G.P., Kolovsky A.R.*//Ibidem. 1987. V. 125. P. 188.  
 13. *Berman G.P., Kolovsky A.R.*// Physica D. 1983. V. 8. P. 117.  
 14. *Reichl L.E., Lin W.A.*// Phys. Rev. 1986. V. A33. P. 3598.  
 15. *Алимов А.Л., Дамаскинский Е.В.*// ТМФ. 1978. Т. 38. С. 58.  
 16. *Kolovsky A.R.* Quasienergy spectrum of the "rotating" two level system (to be published).  
 17. *Kolovsky A.R.*// Phys. Lett. A. 1990. V. 143. P. 129.  
 18. *Kolovsky A.R.*//Opt. Commun. 1991.V.82.P. 466  
 19. *Карпов С.В., Коловский А.Р., Мыслевец С.А., Попов А.К., Слабко В.В.* Препринт ИФ СО АН СССР № 646Ф. — Красноярск, 1990.  
 20. *Casati G., Chirikov B.V., Izrailev P.M., Ford J.*//Lect Notes Phys. 1979. V. 93. P. 334.  
 [21] *Fishman S., Grepel D.R., Prange R.E.*//Phys. Rev. 1984. V. A29. P. 1639.  
 22. *Toda M.*//Phys. Lett. 1985. V. A110. P. 235.  
 23. *Reichl L.E., Haoming Li*// Phys. Rev. 1990. V. A42. P. 4543.  
 24. *Radons C., Prange R.E.*//Phys. Rev. Utt. 1988. V. 61. P. 1691.  
 25. *Fishman S., Grepel D.R., Prange R.E.*//Phys. Rev. 1987. V. A36. P. 289.  
 26. *Берман Г.П., Власова О.Ф., Израйлев Ф.М.*//ЖЭТФ. 1987. Т. 93. С. 470.  
 27. *Vohigas O., Giannoni M.J.*//Lect. Notes Phys. 1984. V. 209. P. 1.  
 28. *Kolovsky A.R.*//Phys. Lett. 1990. V. A148. P. 72.  
 29. *Berman G.P., Zaslavsky G.M.*// Physica A. 1978. V. 91. P. 450.  
 30. *Takahashi K.*//Prog. Theor. Phys. 1989. V. 98. P. 109.  
 [31] *Blumel R., Fishman S., Smilansky U.*//Chem. Phys. 1986. V. 84. P. 2604.  
 32. *Берман Г.П., Коловский А.Р.*//ЖЭТФ. 1988. Т. 95. С. 1552.  
 33. *Graham R.*//Physica Scripta. 1987. V. 35. P. 111.  
 34. *Dittrich T., Graham R.*// Ann. of Phys. 1990. V. 200. P. 363.  
 35. *Toda M., Adachi S., Jkeda K.*// Prog. Theor. Phys. 1989. V. 98. P. 323.  
 36. *Hida K.*// J. Phys. Soc, Japan. 1988. V. 57. P. 75.  
 37. *Коловский А.Р.*//Опт. и спектр. 1990. Т. 69. С. 759.

Статья поступила 15.08.91 г.,  
 после доработки 5.12.91 г.

