

01

## **Бифуркации в траекторной задаче как причина возникновения особенностей внутреннего времени и зарождения квантового (волнового) хаоса**

© А.В. Богданов, А.С. Геворкян, А.Г. Григорян

Институт высокопроизводительных вычислений и баз данных,  
С.-Петербург

Поступило в Редакцию 22 апреля 1999 г.

Предложена новая теория квантово-механического многоканального рассеяния в коллинеарной системе трех тел. На этой простой задаче показано, что принцип квантового детерминизма в общем случае нарушается и мы имеем микронеобратимую квантовую механику. Впервые проведены принципиальные расчеты квантового (волнового) хаоса на примере элементарной реакции  $\text{Li} + (\text{FH}) \rightarrow (\text{LiFH})^* \rightarrow \text{LiF} + \text{H}$ .

На ранней стадии развития квантовой механики А. Эйнштейн поставил вопрос, который привлек всеобщее внимание несколькими десятилетиями позже [1]. Вопрос заключался в следующем: что будет представлять собой классическая хаотическая система в квантовом случае. В качестве наглядного примера он, в частности, указал на систему трех тел.

Ранее проблема квантового хаоса была исследована авторами на примере квантово-механического рассеяния в коллинеарной системе трех тел [2,3]. Было показано, что эту задачу можно свести к задаче ангармонического осциллятора с нетривиальным временем (внутренним временем), которое в общем случае может иметь хаотическое поведение. В данной работе продолжаются исследования задачи квантового хаоса с использованием численных расчетов на примере элементарной химической реакции.

## 1. Постановка задачи

Задачу квантового многоканального рассеяния в рамках коллинеарной модели можно схематически представить следующим образом:

$$A + (BC)_n \rightarrow \begin{cases} A + (BC)_m \\ (AB)_m + C \\ A + B + C \end{cases} \quad (1)$$

$$(ABC)^* \rightarrow \begin{cases} A + (BC)_m \\ (AB)_m + C \\ A + B + C, \end{cases}$$

где  $m$  и  $n$  — колебательные квантовые числа, соответствующие (*in*) и (*out*) каналам рассеяния. Как было показано в предыдущих работах [2,3], проблему квантового многоканального рассеяния (1) можно сформулировать как задачу эволюции волнового пакета на многообразии  $M$  (расслоении Лагранжевой поверхности  $S_p$ ) в рамках движущейся на  $S_p$  локальной координатной системы отсчета

$$S_p = \{x^1, x^2; 2\mu_0(E - V(x^1, x^2)) > 0\}, \quad \mu_0 = \left\{ \frac{m_A m_B m_C}{m_A + m_B + m_C} \right\}^{1/2}, \quad (2)$$

где  $m_A, m_B, m_C$  — массы соответствующих частиц,  $E$  и  $V(x^1, x^2)$  — соответственно полная энергия и потенциал взаимодействия системы. Метрика на поверхности  $S_p$  вводится следующим образом:

$$g_{ik} = P^2(x^1, x^2)\delta_{ik}, \quad P^2(x^1, x^2) = 2\mu_0(E - V(x^1, x^2)). \quad (3)$$

Движение локальной координатной системы определяется проекцией движения изображающей точки с приведенной массой  $\mu_0$  на экстремальный луч  $\mathfrak{S}_{ext}$  Лагранжевого многообразия  $S_p$ . Заметим, что для задачи рассеяния (1) существует два экстремальных луча на поверхности  $S_p$ : один соединяет канал (*in*) с каналом (*out*) реакции перегруппировки, в то время как второй луч соединяет каналы (*in*) и (*out*) реакции диссоциации. Далее мы будем изучать реакцию перегруппировки.

Введем криволинейную координатную систему  $(x^1, x^2)$  на Евклидовом пространстве  $R^2$  вдоль проекции экстремального луча  $\mathfrak{S}_{ext}$  таким образом, чтобы  $x^1$  изменялась вдоль  $\mathfrak{S}_{ext}$ , а  $x^2$  изменялась в перпендикулярном направлении. В этом случае траектория изображающей

точки описывается следующей системой дифференциальных уравнений второго порядка:

$$x_{,ss}^k + \left\{ \frac{k}{ij} \right\}_{S_p} x_{,s}^i x_{,s}^j = 0 \quad (i, j, k = 1, 2), \quad (4)$$

где

$$x_{,s}^i = \frac{dx^i}{ds} \quad \text{и} \quad \left\{ \frac{k}{ij} \right\}_{S_p} = \frac{1}{2} g^{kl} \left( \frac{\partial g_{lj}}{\partial x^i} + \frac{\partial g_{il}}{\partial x^j} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^l} \right).$$

Уравнение (4) с начальными условиями

$$x_0^i = x^i(-\infty), \quad x_0^j = x_{,s}^j(-\infty) \quad (5)$$

в любой момент времени  $t$  имеет единственное решение  $x^i(t)$  и  $x^i(t)$  — геодезическую траекторию и геодезическую скорость.

Теперь перейдем к квантовому рассмотрению процесса перегруппировки. Заметим, что в квазиклассическом пределе такое рассмотрение эквивалентно описанию потока траекторий на Лагранжевой поверхности  $S_p$ . Изучение этого потока траекторий удобно проводить в локальной координатной системе, движение которой определяется решением  $x^1(s)$  системы (4). Квантование соответствующего потока должно проводиться в указанной координатной системе на расслоении  $M$  Лагранжевой поверхности  $S_p$ .

Имея в виду вышесказанное, можно написать уравнение Шредингера для системы тел в рамках движущейся локальной системы отсчета [4,5]:

$$\left\{ \hbar^2 \gamma^{-\frac{1}{2}} \left\{ \partial_{x^1(s)} \left[ \gamma^{ij} \gamma^{\frac{1}{2}} \partial_{x^1(s)} \right] + \partial_{x^2(s)} \left[ \gamma^{ij} \gamma^{\frac{1}{2}} \partial_{x^2(s)} \right] \right\} + P^2(x^1(s), x^2(s)) \right\} \Psi = 0, \\ \partial_{x^i(s)} = \partial / \partial x^i(s), \quad (6)$$

где

$$\gamma_{11} = \left( 1 + \frac{\lambda(x^1(s))}{\rho_1(x^1(s))} \right)^2, \quad \gamma_{22} = \left( 1 + \frac{x^2}{\rho_2(x^1(s))} \right)^2, \\ \gamma_{12} = \gamma_{21} = 0, \quad \gamma = \gamma_{11} \gamma_{22} > 0. \quad (7)$$

В (6)  $\lambda$  обозначает длину волны де Бройля на  $\mathfrak{S}_{ext}$ ,  $\rho_1$  и  $\rho_2$  — главные кривизны поверхности  $S_p$  в точке  $x^1 \in \mathfrak{S}_{ext}$  по направлению координат  $x^1$  и  $x^2$ .

Основное отличие уравнения (6) от уравнения Шредингера заключается в том, что независимая координата  $x^1(s)$  является решением системы нелинейных дифференциальных уравнений и поэтому в общем случае не является натуральным параметром. Более того, она при определенных условиях может быть стохастической функцией.

Наша задача — найти решение уравнения (6), которое удовлетворяло бы следующим асимптотическим условиям для полной волновой функции системы тел:

$$\lim_{(s,x^1) \rightarrow -\infty} \Psi^{(+)}(x^1(s), x^2) = \Psi_{in}(n; x^1, x^2) + \sum_{m \neq n} R_{mn} \Psi_{in}(m; x^1, x^2),$$

$$\lim_{(s,x^1) \rightarrow +\infty} \Psi^{(+)}(x^1(s), x^2) = \sum_m S_{mn} \Psi_{out}(m; x^1, x^2), \quad (8)$$

где коэффициенты  $R_{mn}$  и  $S_{mn}$  — соответственно амплитуды вероятностей возбуждения и перегруппировки.

Дальнейшее аналитическое исследование уравнения (6) с граничными условиями (8) возможно только после его упрощения.

## 2. Решение уравнения Шредингера на многообразии $M(\mathfrak{S}(u))$

Учитывая тот факт, что волновая функция локализована вдоль координаты реакции  $\mathfrak{S}$ , и основываясь на методе параболического уравнения [6] для такой задачи, представим решение уравнения (6) в виде

$$\Psi^{(+)}(x^1(s), x^2) = \exp\left(i\hbar^{-1} \int_0^{x^2(s)} p(x^1) \sqrt{\gamma_0} dx^1\right) A(x^1(s), x^2), \quad (9)$$

где  $\gamma_0 = \gamma(x^1(s), x^2)|_{x^2=0}$  и  $p(x^1(s)) = P(x^1(s), x^2)|_{x^2=0}$ .

После преобразования координат в выражении (6)

$$\tau = (E)^{-1} \int_0^{x^1(s)} p(x^1) \sqrt{\gamma_0} dx^1, \quad z = (\hbar E)^{-\frac{1}{2}} p(x^1(s)) x^2$$

с учетом квазиклассического приближения [7] можно получить полную волновую функцию трехчастичной системы в гармоническом приближении

$$\tilde{\Psi}^{(+)}(n; z, \tau) = \left[ \frac{(\Omega_{in}/\pi)^{\frac{1}{2}}}{2^n n! |\xi|} \right]^{\frac{1}{2}} \exp[i\hbar^{-1} S_{eff}(z, \tau)] H_n \left[ \frac{\sqrt{\Omega_{in}}}{|\xi|} (z - \eta) \right], \quad (10)$$

$$\begin{aligned} S_{eff}(z, \tau) &= S_{cl}(\tau) - E_v^i \int_0^\tau |\xi|^{-2} d\tau' \\ &\quad + \left\{ \dot{\eta}(z - \eta) + \frac{1}{2} \dot{\xi} \xi^{-1} (z - \eta)^2 - \frac{1}{2} \dot{p} p^{-1} z^2 \right\}, \\ S_{cl}(\tau) &= E\tau - E \int_{-\infty}^\tau \left\{ \frac{1}{2} [(\dot{\eta})^2 - \Omega^2(\tau') \eta^2] + F(\tau') \eta \right\} d\tau', \\ E_v^i &= \hbar \Omega_{in} \left( n + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (11)$$

Напомним, что функция  $\xi(\tau)$  является решением классической задачи осциллятора

$$\begin{aligned} \ddot{\xi} + \Omega^2(\tau) \xi &= 0, \quad \Omega^2(\tau) = - \left( \frac{E}{p} \right)^2 \left\{ \frac{1}{p^2} + \sum_{k=1}^2 \left[ \frac{p_{;kk}}{p} + \left( \frac{p_{;k}}{p} \right)^2 \right] \right\}, \\ p_{;k} &= \frac{dp}{dx^k} \end{aligned} \quad (12)$$

с асимптотическим поведением

$$\begin{aligned} \xi(\tau)_{\tau \rightarrow -\infty} &\sim \exp(i\Omega_{in}\tau_-), \\ \xi(\tau)_{\tau \rightarrow +\infty} &\sim c_1 \exp(i\Omega_{out}\tau_+) - c_2 \exp(-i\Omega_{out}\tau_+), \end{aligned} \quad (13)$$

где  $\tau_- = 2\mu_0 x^1 / p_-$  и  $\tau_+ = 2\mu_0 x^1 / p_+$  — внутреннее время в асимптотических подпространствах  $R_{in}^2$  и  $R_{out}^2$ , соответственно импульсы в асимптотике определяются как  $p_{\mp} = \lim_{x^1 \rightarrow \mp \infty} p(x^1)$ , а константы  $c_1$  и  $c_2$  находятся из решения уравнения (12).

Что касается функции  $\eta(\tau)$ , она выражается через решение однородного уравнения (12):

$$\eta(\tau) = (2\Omega_{in})^{-\frac{1}{2}} [\xi(\tau)d^*(\tau) + \xi^*(\tau)d(\tau)], \quad \eta(-\infty) = \dot{\eta}(-\infty) = 0,$$

$$d(\tau) = (2\Omega_{in})^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\tau} d\tau' \xi(\tau') F(\tau'), \quad F(\tau) = \frac{(E)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{p} \left[ \frac{p;2}{p} - \frac{1}{\rho_2} \right]. \quad (14)$$

Заметим, что в пределе  $\tau \rightarrow -\infty$  точная волновая функция (10) переходит к своему асимптотическому значению — к волновой функции гармонического осциллятора с частотой  $\Omega_{in}$ .

### 3. Точное представление для $S$ -матрицы в терминах внутреннего времени. Вероятность перехода перегруппировки

Рассмотрим точное представление для  $S$ -матрицы через полные волновые функции состояний (*in*) и (*out*) [8]

$$\Psi^{(+)}(n; x^1(s)x^2) = \sum_k S_{kn} \Psi^{(-)}(k; x^1(s), x^2). \quad (15)$$

Принимая во внимание, что асимптотические волновые функции образуют базисный набор в пространстве  $R_{out}^2$ , можно получить после проектирования выражения (15) на асимптотическое состояние в пределе  $x^1 \rightarrow +\infty$  следующее выражение:

$$S_{mn} = \lim_{(s, x^1) \rightarrow +\infty} \langle \Psi_{out}^*(m; x^1, x^2) \Psi^{(+)}(n; x^1, x^2) \rangle_{x^2}$$

$$= \lim_{\tau \rightarrow +\infty} \langle \tilde{\Psi}_{out}^*(m; z_+, \tau_+) \tilde{\Psi}^{(+)}(n; z, \tau) \rangle_z, \quad \langle \dots \rangle_z = \int_{-\infty}^{+\infty} dz. \quad (16)$$

Таким образом, мы получили новое представление для  $S$ -матрицы, которое на одно интегрирование меньше, чем стандартное. Так как в данном случае переменная  $x^1(s)$  или  $\tau$  играет роль натурального параметра  $s$  (обычного времени) в теории рассеяния, а выражение (16)

аналогично нестационарному представлению  $S$ -матрицы, то мы, следуя Пригожину [9], будем называть  $\tau$  "внутренним" временем системы трех тел.

Воспользуемся точным представлением  $S$ -матрицы (16) для расчета амплитуды вероятности перехода реакции. Используя выражение (10) для полной волновой функции и выражение (16) для ее асимптотического предела, получаем конечное выражение для амплитуды вероятности перехода реакции  $A + (B, C)_n \rightarrow (ABC)^* \rightarrow (A, B)_m + C$ , протекающей через стадию образования резонансного комплекса:

$$W_{mn} = |S_{mn}|^2 = \frac{(1-\theta)^{1/2}}{m!n!} |H_{mn}(b_1, b_2)|^2 \exp \left[ -\nu \left( 1 - \sqrt{\theta} \cos 2\varnothing \right) \right]. \quad (17)$$

Здесь функция  $H_{mn}(b_1 b_2)$  обозначает комплексный полином Эрмита и, кроме того:

$$b_1 = \sqrt{\nu(1-\theta)} \exp(i\varnothing),$$

$$b_2 = -\sqrt{\nu} \left[ \exp(-i\varnothing) - \sqrt{\theta} \exp(i\varnothing) \right], \quad \varnothing = \frac{1}{2}(\delta_1 + \delta_2) - \beta. \quad (18)$$

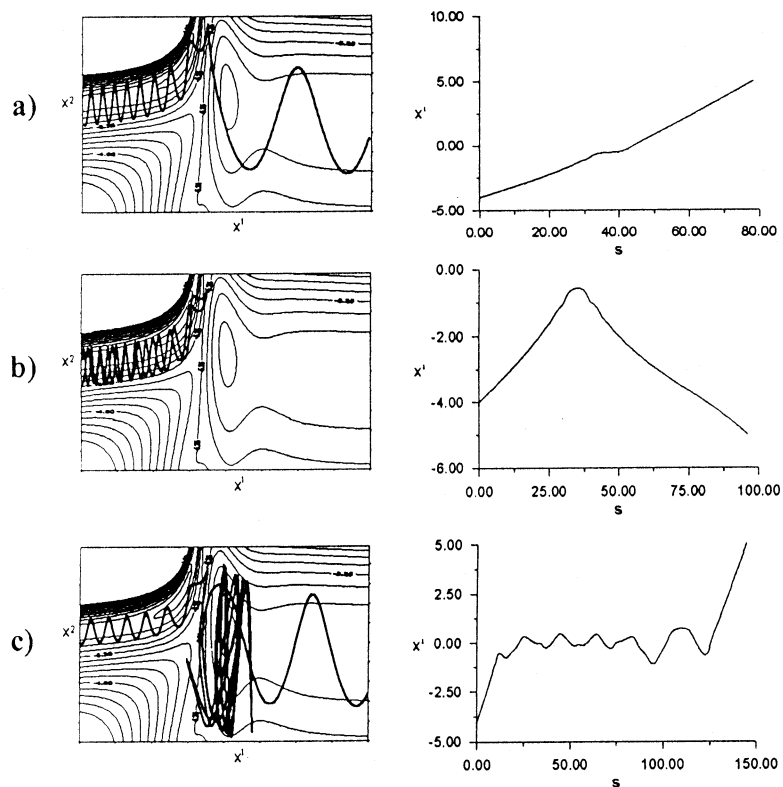
Переменные  $\theta$ ,  $\delta_1$ ,  $\delta_2$ ,  $\beta$  и  $\nu$  определяются коэффициентами  $c_1$ ,  $c_2$  и решением  $\xi(\tau)$  (см. [10])

$$c_1 = e^{i\delta_1} (\Omega_{in}/\Omega_{out})^{1/2} (1-\theta)^{-1/2}, \quad c_2 = e^{i\delta_2} (\Omega_{in}/\Omega_{out})^{1/2} [\theta/(1-\theta)]^{1/2}$$

$$\theta = |c_2/c_1|^2, \quad d = \lim_{\tau \rightarrow +\infty} d(\tau) = \sqrt{\nu} \exp(i\beta). \quad (19)$$

#### 4. Исследование зависимости внутреннего времени от обычного времени — натурального параметра

Теперь мы можем перейти к доказательству возможности возникновения хаоса в волновой функции систем трех тел (10), который мы будем называть квантовым хаосом. Подчеркнем, что в этом случае поведение вероятности перехода в зависимости от свойств классической траектории будет также нерегулярным. Для этого достаточно показать,



**Рис. 1.** Геодезические траектории и зависимость внутреннего времени от натурального параметра для: *a* — прямой реакции перегруппировки, *b* — прямой реакции отражения и *c* — реакции перегруппировки, проходящей через резонансное состояние.

что решение  $x^1(s)$  при некоторых начальных условиях является нестабильным или хаотическим. Нами детально изучено поведение траектории изображающей точки на Лагранжевой поверхности  $S_p$  на примере элементарной химической реакции  $\text{Li} + (\text{FH})_n \rightarrow (\text{LiFH})^* \rightarrow (\text{LiF})_m + \text{H}$ . Потенциальная поверхность взаимодействия этой реакции была воспроизведена с использованием квантово-механических расчетов, прове-



денных в работе [11]. Было показано, что если начало геодезической траектории  $x_0^2$  в канале (*in*) (т.е.  $x^1 \rightarrow -\infty$ ) фиксировано, то для полной энергии системы  $E \geq 1.4 \text{ eV}$  поведение траекторий (в смысле их прохождения в (*out*) или отражения в (*in*) каналы) чередуется регулярным образом (рис. 1, *a, b*).

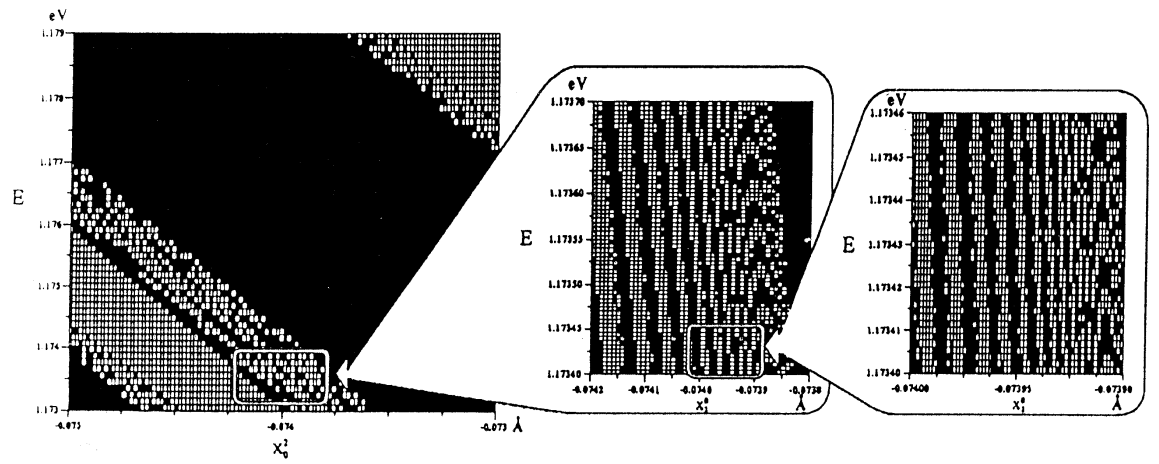
Начиная со значения энергии  $E = 1.4 \text{ eV}$  и вплоть до пороговой энергии реакции  $1.1 \text{ eV}$  наблюдается нестабильное поведение геодезических траекторий в зависимости от энергии, что иногда приводит к их полному перемешиванию в промежуточной области и вызывает образование резонансного комплекса  $(\text{LiFH})^*$  (рис. 1, *c*).

Численные расчеты старшего показателя Ляпунова показали, что он принимает положительные значения для всего диапазона энергий. Однако начиная с энергии  $1.4 \text{ eV}$  и выше его рост незначителен. В диапазоне же энергий от  $1.4$  до  $1.1 \text{ eV}$  происходит быстрый рост старшего показателя Ляпунова. Этот факт указывает на экспоненциальную расходимость траекторий. Для указанного диапазона энергий регулярное чередование проходящих и отраженных траекторий нарушается и образуется область стохастического поведения траекторий. Численные исследования в этом диапазоне показали, что характер области хаотического поведения траекторий самоподобен относительно масштабного преобразования (рис. 2).

Для данных начальных значений эволюция соответствующей классической задачи является хаотической и движение локальной координатной системы также стохастично. Легко видеть, что в такой ситуации поведение  $x^1(s)$  также является хаотическим, что верно и по отношению ко внутреннему времени  $\tau(x^1(s))$ , которое, по сути, является хронологизирующим параметром квантовой эволюции в системе трех тел.

Можно показать, что хаотическое поведение внутреннего времени  $\tau(x^1(s))$  приводит к стохастическому поведению решения эталонного уравнения  $\xi(\tau(x^1(s)))$ . Это верно и для представления волновой функции (10) и вероятности перехода (18). Таким образом, при строгом рассмотрении простой модели многоканального рассеяния (1) в рамках системы уравнений (4), (6) наблюдается нарушение принципа квантового детерминизма и возникает квантовый хаос.

В конце подчеркнем, что полученные результаты согласуются с теорией переходного комплекса (см. [12]), суть которой заключается в стохастическом описании химических реакций. Кроме того, в рамках развитого представления дается ответ на возражения А. Эйнштейна



**Рис. 2.** Нерегулярная карта начальных значений полной энергии  $E$  и координаты  $x_0^2$  для проходящих (белые квадраты) и отраженных (черные квадраты) геодезических траекторий.

относительно несводимости квантовой механики к классической хаотической динамике. В работе исследована амплитуда вероятности перегруппировки на примере реакции  $\text{Li} + (\text{FH})_n \rightarrow (\text{LiFH})^* \rightarrow (\text{LiF})_m + \text{H}$  и показано, что в области, где число особенностей внутреннего времени велико, оно имеет стохастический характер. Было также показано, что развитое представление удовлетворяет требованиям предельных переходов, включая переход из области  $Q_{ch}$  в область  $P$ . Этот переход происходит при устремлении  $\hbar$  к нулю и при  $E_k^i < E_c$ .

## Список литературы

- [1] *Einstein A.* // Vehr. Dtsch. Phys. Ges. 1917. V. 19. P. 82.
- [2] *Bogdanov A.V., Gevorkyan A.S.* // Proceedings of the International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications. Hilton Hawaiian Village, 1997. V. 2. P. 693–696.
- [3] *Bogdanov A.V., Gevorkyan A.S.* Multichannel Scattering Closed Tree-Body System as a Example of Irreversible Quantum Mechanics. Los Alamos National Laboratory e-Print archive, quant-ph/9712022.
- [4] *Богданов А.В., Геворкян А.С.* Многоканальное рассеяние в коллинеарной системе трех тел как пример необратимой квантовой механики. Препринт ИВВиБД-1-97.
- [5] *Bogdanov A.V., Gevorkyan A.S., Grigoryan A.G., Matveev S.A.* // Int. J. of Bifurcation and Chaos (accepted for publication).
- [6] *Бабич В.М., Булдырев Б.С.* Асимптотические методы в задаче дифракции коротких волн. М.: Наука, 1972.
- [7] *Bogdanov A.V., Gevorkyan A.S.* Proceedings of International Workshop QS-96. Minsk: Belarus, 1996. P. 34–40.
- [8] *Newton R.G.* Scattering Theory of Waves and Particles. McGraw-Hill book Comp. N.Y., 1966.
- [9] *Prigogine I.* From Being to Becoming: Time and Complexity in the Physical Sciences. San Francisco, W.H. Freeman and Company, 1980.
- [10] *Бязь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971.
- [11] *Carter S., Murrell J.N.* // Molecular Physics. 1980. V. 41. N 3. P. 567–581.
- [12] *Никитин Е.Е.* Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах. М.: Химия, 1970.