

КВАНТОВАНИЕ ГАМИЛЬТОНОВЫХ СИСТЕМ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА НОРМАЛЬНЫХ ФОРМ

И.Н.Беляева, И.К.Кириченко*, Н.Н.Чеканова**, Т.А.Ярхо***

QUANTIZATION OF HAMILTONIAN SYSTEMS USING THE NORMAL FORM METHOD

I.N.Belyaeva, I.K.Kirichenko*, N.N.Chekanova**, T.A.Yarkho***

Белгородский государственный национальный исследовательский университет

*Национальный университет гражданской защиты Украины, Харьков, Украина

**Харьковский национальный университет имени В.Н.Каразина, Украина

***Харьковский Национальный автомобильно-дорожный университет, Украина

Изложена схема нормализации гамильтоновых систем с произвольным конечным числом степеней свободы, а также нормализация для двух степеней свободы с равными частотами. Получены нормальные формы для классического ангармонического осциллятора с четвертой степенью нелинейности и для нелинейной двумерной гамильтоновой системы. С применением двух правил квантования Борна—Йордана и Вейля—Маккоя получены квантовые нормальные формы, для которых решены задачи на собственные значения и вычислены аналитические приближенные формулы для изэнергетических спектров. Для конкретных гамильтоновых систем выполнено сравнение полученных спектров с имеющимися результатами в текущей литературе и найдено очень хорошее согласие. Обнаружено, что оба правила квантования классической нормальной формы приводят практически к одинаковым результатам в спектрах.

Ключевые слова: гамильтоновы системы, нормальная форма, квантование, энергетические спектры, математическое моделирование

Для цитирования: Беляева И.Н., Кириченко И.К., Чеканова Н.Н., Ярхо Т.А. Квантование гамильтоновых систем с помощью метода нормальных форм // Вестник НовГУ. Сер.: Технические науки. 2020. №5(121). С.72-77. DOI: [https://doi.org/10.34680/2076-8052.2020.5\(121\).72-77](https://doi.org/10.34680/2076-8052.2020.5(121).72-77).

A scheme for normalizing Hamiltonian systems with an arbitrary finite number of degrees of freedom is described, as well as normalization for two degrees of freedom with equal frequencies. Normal forms are obtained for a classical anharmonic oscillator with the fourth degree of nonlinearity and for a nonlinear two-dimensional Hamiltonian system. Using two Born—Jordan and Weyl—McCoy quantization rules, quantum normal forms are obtained for which eigenvalue problems are solved and analytical approximate formulas for is-energy spectra are calculated. For specific Hamiltonian systems, the obtained spectra are compared with the available results in the current literature and a very good agreement is found. It is found that both quantization rules of the classical normal form lead to almost identical results in the spectra.

Keywords: Hamiltonian systems, normal form, quantization, energy spectra, mathematical modeling

For citation: Belyaeva I.N., Kirichenko I.K., Chekanova N.N., Yarkho T.A. Quantization of Hamiltonian systems using the normal form method // Vestnik NovSU. Issue: Engineering Sciences. 2020. №5(121). С.72-77. DOI: [https://doi.org/10.34680/2076-8052.2020.5\(121\).72-77](https://doi.org/10.34680/2076-8052.2020.5(121).72-77).

Пусть классическая система с n степенями свободы описывается функцией Гамильтона, которая может быть представлена в следующем виде

$$H(q, p) = H^{(2)}(q, p) + \sum_{s \geq 3} H^{(s)}(q, p), \quad (1a)$$

$$H^{(2)}(q, p) = \sum_{v=1}^n \frac{\omega_v}{2} (q_v^2 + p_v^2), \quad H^{(s)}(q, p) = \sum_{|i|+|j|=s} a_{ij} q^i p^j, \quad (1b)$$

q, p — n -мерные канонически сопряженные координаты и импульсы, $q^i \equiv q_1^{i_1} \cdot q_2^{i_2} \cdot q_3^{i_3} \cdots q_n^{i_n}, i = i_1 + i_2 + \cdots + i_n$, ω_v — частоты.

Метод нормализации состоит в выполнении последовательности канонических преобразований $(q, p) \rightarrow (\xi, \eta)$, таких, что в новых переменных $H(q, p) \rightarrow G(\xi, \eta)$ функция $G(\xi, \eta)$ имела бы более простой вид. В частности, формально это означает, что выполняется условие

$$DG(\xi, \eta) = 0, \quad (2a)$$

$$D \equiv \sum_{v=1}^n \omega_v \left(\xi_v \frac{\partial}{\partial \eta_v} - \eta_v \frac{\partial}{\partial \xi_v} \right), \quad (2b)$$

$$D \equiv \sum_{v=1}^n \omega_v \left(\xi_v \frac{\partial}{\partial \eta_v} - \eta_v \frac{\partial}{\partial \xi_v} \right). \quad (2b)$$

Есть оператор нормальной формы, который можно записать через скобку Пуассона как $D(*) = -\{H^{(2)}, (*)\}$.

Необходимая для таких канонических преобразований производящая функция может быть выбрана в виде

$$F(q, \eta) = q \cdot \eta + W^{(s)}(q, \eta), \quad (3)$$

где $W^{(s)}(q, \eta)$ представляет собой однородный полином степени s по n -мерным переменным (q, η) .

Взаимосвязь между старыми и новыми каноническими переменными определяется уравнениями

$$\xi_k = q_k + \frac{\partial W^{(s)}(q, \eta)}{\partial \eta_k}, \quad p_k = \eta_k + \frac{\partial W^{(s)}(q, \eta)}{\partial q_k}, \quad H(q, p) = G(\xi, \eta). \quad (4)$$

Разлагая гамильтонианы $H(q, p), G(\xi, \eta)$ в ряд Тейлора вблизи точек h и q и приравнявая члены с одинаковыми степенями, получаем основное уравнение

$$DW^{(s)}(q, \eta) = G^{(s)}(q, \eta) - H^{(s)}(q, \eta), \quad (5)$$

из которого следует найти две величины $W^{(s)}(q, \eta)$ и $G^{(s)}(q, \eta)$ при известной величине $H^{(s)}(q, \eta)$. Можно сразу же заметить, что нормальная форма для

$$H^{(2)}(q, p) \text{ равна } G^{(2)}(\xi, \eta) = \sum_{v=1}^n \omega_v (\xi_v^2 + \eta_v^2) / 2. \text{ Поэтому}$$

решение основного уравнения (5) надо находить для $s = 3, 4, \dots, S_{\max}$.

Для решения основного уравнения (5) временно переходим к промежуточным каноническим переменным (x, y) :

$$q = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy), \quad \eta = \frac{i}{\sqrt{2}}(x - iy). \quad (6)$$

В этих переменных основное уравнение (5) запишем в виде

$$\tilde{D}\tilde{W}^{(s)}(q, \eta) = \tilde{G}^{(s)}(q, \eta) - \tilde{H}^{(s)}(q, \eta), \quad (7)$$

при этом оператор нормальной формы (2б) будет равен

$$\tilde{D} = i \sum_{v=1}^n \omega_v \left(x_v \frac{\partial}{\partial x_v} - y_v \frac{\partial}{\partial y_v} \right). \quad (8)$$

Линейный оператор $\tilde{D}$ определен в функциональном пространстве всех однородных полиномов степени s от $2n$ переменных (x, y) . Размерность этого пространства определяется формулой

$$M = \frac{(2n+s-1)!}{(2n-1)!(s)!}. \quad (9)$$

Мономы вида $\Phi^{(s)} = x^l y^m$, $s = |l| + |m|$ образуют в нем базис. Эти мономы являются собственными функциями оператора нормальной формы $\tilde{D}$:

$$\tilde{D}\Phi^{(s)} = \left(i \sum_{v=1}^n \omega_v (m_v - l_v) \right) \Phi^{(s)}. \quad (10)$$

Тогда решение основного уравнения (7) можно записать в виде

$$\tilde{D}W^{(s)} = \tilde{D}^{-1} [\tilde{G}^{(s)} - \tilde{H}^{(s)}] \Phi^{(s)}, \quad \tilde{D}^{-1} = \frac{\Phi^{(s)}}{\left(i \sum_{v=1}^n \omega_v (m_v - l_v) \right)}. \quad (11)$$

Так как известный моном $H^{(s)}(x, y)$ может быть представлен в виде суммы двух мономов $\tilde{H}^{(s)} = \tilde{N}^{(s)} + \tilde{R}^{(s)}$, где $\tilde{D}\tilde{N}^{(s)} = 0$, то из основного уравнения получаем нормальную форму $\tilde{G}^{(s)} = \tilde{N}^{(s)}(x, y)$ и алгебраическое уравнение для

производящего монома $W^{(s)}(x, y)$ при условии, что

$$\sum_{v=1}^n \omega_v (m_v - l_v) \neq 0. \text{ Совершая обратные преобразова-$$

ния от переменных (x, y) к переменным (ξ, η) , находим нормальную форму и производящую функцию. Биркгоф изучал нормальную форму для несоизмеримых частот (случай $(m_v - l_v) \neq 0$) [1], а Густавсон распространил этот метод нормализации на случай соизмеримых частот [2]. Поэтому полученная таким образом нормальная форма в литературе часто называется нормальной формой Биркгофа—Густавсона.

Однако выполнение процедуры по изложенной выше схеме требует крайне трудоемких вычислений. К примеру, количество однородных полиномов $\Phi^{(s)} = x^l y^m$, $s = |l| + |m|$ при $s = s_{\max} = 10$ для систем с двумя степенями свободы равно $M = 286$, а для трех степеней свободы это число равно $M = 3003$. Поэтому желательно процедуру нормализации выполнять с помощью современных вычислительных машин. Первые такие вычисления были проведены Густавсоном, который составил программу на FORTRAN и вычислил нормальную форму вместе с приближенным интегралом движения для гамильтоновой системы Хенона—Хейлеса [3]. Многими авторами были разработаны различные варианты получения нормальной формы, обзоры которых изложены, например, в работах [4–7].

Пусть дана классическая функция Гамильтона, описывающая ангармонический осциллятор с нелинейностью четвертой степени, которая описывает гамильтонову систему с одной степенью свободы.

Пример 1.

$$H(q, p) = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) + \alpha q^4, \quad (1.1)$$

α — произвольный параметр.

Согласно описанной выше схеме нормализации с помощью компьютерной программы символьных вычислений [8] для функции Гамильтона (1.1) была вычислена ее нормальная форма до степени $S_{\max} = 10$ в виде

$$G_{12} = \sum_{k=1}^{k=6} G^{(2k)}, \quad G^{(2)} = \frac{1}{2}(\xi^2 + \eta^2), G^{(4)} = \frac{3\alpha}{8}(\xi^2 + \eta^2)^2, G^{(6)} = -\frac{17\alpha^2}{32}(\xi^2 + \eta^2)^3, \quad (1.2)$$

$$G^{(8)} = -\frac{375\alpha^3}{256}(\xi^2 + \eta^2)^4, G^{(10)} = -\frac{10689\alpha^4}{2048}(\xi^2 + \eta^2)^5,$$

$$G^{(12)} = -\frac{87549\alpha^5}{4096}(\xi^2 + \eta^2)^6.$$

Нормальную форму (1.2) для дальнейшего удобно представить в новых комплексно сопряженных классических переменных:

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}}(\eta + i\xi), \quad \bar{z} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\eta - i\xi). \quad (1.3)$$

Тогда классическая нормальная форма запишется в виде

$$G_{12} = z\bar{z} + \frac{3}{8}\alpha z^2\bar{z}^2 - \frac{17}{32}\alpha^2 z^3\bar{z}^3 + \frac{375}{256}\alpha^3 z^4\bar{z}^4 - \frac{10689}{2048}\alpha^4 z^5\bar{z}^5 + \frac{87549}{4096}\alpha^5 z^6\bar{z}^6. \quad (1.4)$$

Для получения квантового аналога классической нормальной формы (1.4) используем правило соответствия Вейля—Маккоя [9,10], согласно которому каждому моному $\bar{z}^n \cdot z^m$ сопоставляется определенное дифференциальное выражение

$$\bar{z}^n z^m \equiv z^m \bar{z}^n \rightarrow \frac{1}{2^m} \sum_{l=0}^m \frac{m!}{l!(m-l)!} \hat{a}^{+l} \hat{a}^n \hat{a}^{+(m-l)}, \quad (1.5a)$$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{i\sqrt{2}} \left(\frac{d}{d\xi} - \xi \right), \quad \hat{a} = \frac{1}{i\sqrt{2}} \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right), \quad \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1,$$

$$\hat{N} \equiv \hat{a}^+ \hat{a} = -\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + 1 \right). \quad (1.5b)$$

Тогда классической нормальной форме (1.4) будет соответствовать ее квантовый аналог в виде

$$\hat{\Gamma}_S = \sum_k A_{2k} \cdot \left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + 1 \right) \quad (1.6)$$

или

$$\hat{\Gamma}_{12} = \sum_k \hat{\Gamma}^{(2k)}, \quad (k=1, \dots, 6), \quad (1.7)$$

$$\hat{\Gamma}^{(2)} = \hat{N} + 1/2, \quad \hat{\Gamma}^{(4)} = \frac{3\alpha}{2} (\hat{N}^2 + \hat{N} + 1/2),$$

$$\hat{\Gamma}^{(6)} = -\frac{17\alpha^2}{4} (\hat{N}^3 + 3/2 \hat{N}^2 + 2\hat{N} + 3/4),$$

$$\hat{\Gamma}^{(8)} = \frac{375\alpha^3}{16} (\hat{N}^4 + 2\hat{N}^3 + 5\hat{N}^2 + 4\hat{N} + 3/2),$$

$$\hat{\Gamma}^{(10)} = -\frac{10689\alpha^4}{16} (\hat{N}^5 + 5/2 \hat{N}^4 + 10\hat{N}^3 + 25/2 \hat{N}^2 + 23/2 \hat{N} + 15/4),$$

$$\hat{\Gamma}^{(12)} = \frac{87549\alpha^5}{64} \times$$

$$\times (\hat{N}^6 + 3\hat{N}^5 + 35/2 \hat{N}^4 + 30\hat{N}^3 + 49\hat{N}^2 + 69/2 \hat{N} + 45/4), \quad \hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}.$$

Квантовая нормальная форма (1.7) представляет приближенно уравнение Шредингера для начального классического гамильтониана (1.1). Задача на собственные значения $\hat{\Gamma}_{12}\Phi(\xi) = E\Phi(\xi)$ легко решается. В результате получаем энергетический спектр для ангармонического осциллятора (1.1):

$$E_{12} = \sum_{k=1}^6 E^{(2k)}, \quad (1.8)$$

$$E^{(2)} = n + 1/2, \quad E^{(4)} = \frac{3\alpha}{2} (n^2 + n + 1/2),$$

$$E^{(6)} = -\frac{17\alpha^2}{4} (n^3 + 3/2 n^2 + 2n + 3/4),$$

$$E^{(8)} = \frac{375\alpha^3}{16} (n^4 + 2n^3 + 5n^2 + 4n + 3/4),$$

$$E^{(10)} = -\frac{10689\alpha^4}{64} (n^5 + 5/2 n^4 + 10n^3 + 25/2 n^2 + 23/2 n + 15/4),$$

$$E^{(12)} = -\frac{87549\alpha^5}{64} (n^6 + 3n^5 + 35/2 n^4 + 30n^3 + 49n^2 + 69/2 n + 45/4),$$

$$n=0, 1, \dots$$

В табл.1 приведены значения уровней энергии E_S , вычисленные нами по полученной формуле (1.8), и их значения, которые получены прямым численным решением соответствующего уравнения Шредингера.

Таблица 1

Сравнение уровней энергии $2 \cdot E_S$, вычисленных по формуле (1.8), с их значениями, полученными прямым численным решением соответствующего уравнения Шредингера [11]

$\alpha = 0,001$			
n	E_S	E_Q	$\delta, \%$
0	1,000748414	1,000748692	0,000027
1	3,003738922	3,003739748	0,000027
2	5,009710511	5,009711872	0,000027
3	7,018650709	7,018652592	0,000027
4	9,030547175	9,030549566	0,000027
5	11,04538770	11,04539058	0,000026
6	13,06316020	13,06316357	0,000026
7	15,08385274	15,08385658	0,000025
8	17,10745349	17,10745779	0,000025
9	19,13395074	19,13395549	0,000025
10	21,1633329	21,16333810	0,000024

Из таблицы видно, что значения энергий, вычисленных по формуле (1.8), находятся в хорошем согласии с результатами работы [11] (величина $\delta, \%$ означает относительную ошибку). Если же величина параметра равна $\alpha = 0,001$, то относительная ошибка для первых пяти уровней изменяется в пределах от $\delta = 0,0024$ до $\delta = 0,0008$. Таким образом, квантование при помощи нормальных форм с применением правила квантования Вейля—Маккоя приводит к достаточно точному вычислению энергетического спектра для классического ангармонического осциллятора с четвертой степенью нелинейности.

Ниже изложим схему получения нормальной формы, которая удобна для проведения квантования двумерных гамильтоновых систем с равными частотами [7], т. е. имеющих вид

$$H = (p_1^2 + q_1^2 + p_2^2 + q_2^2) + V(q_1, q_2).$$

Квантование таких классической системы можно эффективно выполнить, если нормализацию провести в следующих канонически сопряженных переменных (Q, P) [7]:

$$Q_1 = \frac{1}{2}(q_2 - ip_2) + \frac{i}{2}(q_1 - ip_1), \quad Q_2 = \frac{1}{2}(q_2 - ip_2) - \frac{i}{2}(q_1 - ip_1), \quad (15)$$

$$P_1 = \frac{1}{2}(q_2 + ip_2) - \frac{i}{2}(q_1 + ip_1), \quad P_2 = -\frac{1}{2}(q_2 + ip_2) + \frac{i}{2}(q_1 + ip_1),$$

в которых оператор нормальной формы изначально является диагональным. Заметим, что эти преобразования являются каноническими с валентностью, равной мнимой единице.

В этом случае нормализация выполняется каноническим преобразованием при помощи производящей функции

$$F(Q, P) = Q_1 P_1 + Q_2 P_2 + \sum_{s=3}^{S_{\max}} W^{(s)}(Q, P), \quad (16a)$$

$$W^{(s)}(Q, P) = Q_1^{l_1} Q_2^{l_2} P_1^{m_1} P_2^{m_2}, \quad s = l_1 + l_2 + m_1 + m_2. \quad (16b)$$

Нормальная форма $G(Q, P)$ также ищется в виде суммы однородных мономов по переменным (Q, P) . Из-за предварительного канонического преобразования (15) оператор нормальной формы принимает диагональный вид и мономы $W^{(s)}(Q, P)$ будут его собственными, что упрощает процедуру нормализации.

Пример 2. Пусть двумерная классическая функция Гамильтона имеет вид

$$H = H^{(2)}(q, p) + V(b, c, d, p, q), \quad (2.1a)$$

$$H^{(2)}(q, p) = (p_1^2 + q_1^2 + p_2^2 + q_2^2)/2, \quad (2.1b)$$

$$V(b, c, d, p, q) = b(q_1^2 q_2 + 1/3 \cdot q_2^3) + c q_1^2 q_2^2 + d(q_1^2 + q_2^2)^2. \quad (2.1v)$$

Классическая динамика этой системы исследована в работе [12].

При произвольных значениях параметров классическое движение является хаотическим. Однако было найдено, что для трех наборов ее параметров система является интегрируемой:

1) $c = 4d, b \neq 0, c \neq 0$; 2) $b = c = 0, d \neq 0$; 3) $b = 0, c = -2d, d \neq 0$, и классическое движение имеет регулярный характер.

Для этой системы процедура нормализации была выполнена при помощи компьютерной программы [8] и до степени $S_{\max} = 6$, в частности, получена нормальная форма $G_6(Q_1, Q_2, P_1, P_2) = G_6(b, c, d, Q_1, Q_2, P_1, P_2)$ в виде:

$$\begin{aligned} G_6(Q_1, Q_2, P_1, P_2) = & i(Q_1 P_1 + Q_2 P_2 + C_{41}(Q_1 P_1 + Q_2 P_2)^2 - \\ & - C_{42}(Q_1 P_2 - Q_2 P_1)^2 + C_{43}(Q_1 P_1 - Q_2 P_2)^2 + \\ & + C_{61}(Q_1 P_1 + Q_2 P_2)^2 - C_{62}(Q_1 P_2 + Q_2 P_1)^3 - \\ & - C_{63}(Q_1 P_2 + Q_2 P_1)(Q_1 P_1 + Q_2 P_2)^2 - \\ & - C_{64}(Q_1 P_1 + Q_2 P_2)(Q_1 P_2 - Q_2 P_1)^2 + \\ & + C_{65}((Q_1 P_2 + Q_2 P_1)(Q_1 P_2 - Q_2 P_1)^2 + \\ & + C_{66}(Q_1 P_1 + Q_2 P_2)(Q_1 P_1 - Q_2 P_2)^2) \end{aligned} \quad (17)$$

$$C_{41} = 3d/2 - 5b^2/12, \quad C_{42} = -5b^2/2 - 5b^2/12 + 3c/8,$$

$$C_{43} = -d/2 + c/8,$$

$$C_{61} = -235b^4/432 + 173b^2d/36 + 13b^2c/36 - 17d^2/4,$$

$$C_{62} = -2b^2d/9 + bb^2c/18, \quad C_{65} = 11b^2d/9 - 11b^2c/36,$$

$$C_{63} = -11b^2d/9 + 11b^2c/36,$$

$$C_{64} = -17c^2/64 + 277b^2d/36 + 199b^2c/72 - 235b^4/144 - 17cd/8,$$

$$C_{66} = -9d^2/4 - cd/2 - c^2/64 - b^2d/36 + b^2c/144.$$

Нормальную форму (17) представим в удобном виде для последующего квантования

$$G_6(Q_1, Q_2, P_1, P_2) = i[G^{(2)} + G^{(4)} + G^{(6)}], \quad (18)$$

$$G^{(2)} = Q_1 P_1 + Q_2 P_2,$$

$$\begin{aligned} G^{(4)} = & C_{41}[(Q_1 P_1)^2 + 2(Q_1 P_1)(Q_2 P_2) + (Q_2 P_2)^2] + \\ & + C_{42}[(Q_1 P_2)(Q_2 P_1) - Q_1^2 P_2^2 - Q_2^2 P_1^2] + \\ & + C_{43}[(Q_1 P_1)^2 - 2(Q_1 P_1)(Q_2 P_2) + (Q_2 P_2)^2] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G^{(6)} = & C_{61}[(Q_1 P_1)^3 + 3(Q_1 P_1)^2 \cdot (Q_2 P_2) + \\ & + 3(Q_1 P_1)(Q_2 P_2)^2 + (Q_2 P_2)^3] - C_{62}[(Q_1 P_1)^3 P_2^2 - Q_2^3 P_1^3 + \\ & + 3Q_1(Q_1 P_1)P_2(Q_2 P_2) + 3Q_2(Q_2 P_2)P_1(Q_1 P_1)] - \\ & - C_{63}[(Q_1(Q_1 P_1)^2 P_2 + Q_1 P_2(Q_2 P_2)^2 + Q_2 P_1(Q_1 P_1)^2 + \\ & + Q_2(Q_2 P_2)^2 P_1 + 2Q_1(Q_2 P_2)P_2(Q_2 P_2) + 2Q_2(Q_2 P_2)P_1(Q_1 P_1)] \end{aligned}$$

Для получения квантового аналога $\hat{G}_6$ классической нормальной формы $G_6(Q_1, Q_2, P_1, P_2)$ нужно величинам $Q = \{Q_1, Q_2\}, P = \{P_1, P_2\}$ сопоставить квантовые операторы $\hat{Q}, \hat{P}$, построенные согласно соотношениям (15), в которых классические величины заменены их квантовыми операторами, в частности $p_v \rightarrow \hat{p}_v = -i\partial/\partial q_v, q_v \rightarrow \hat{q}_v = q_v, [\hat{q}_\mu, \hat{p}_\nu] = i\delta_{\mu\nu}$. Тогда коммутатор $[\hat{Q}_\mu, \hat{P}_\nu] = \delta_{\mu\nu}$.

Критический обзор различных правил квантования проведен в монографии [13].

В связи с тем, что классическая нормальная форма содержит произведения типа $(Q_\mu)^m \cdot (P_\nu)^n$, то для получения квантового аналога воспользуемся двумя известными правилами сопоставления классическим переменным их квантовых операторов: правило квантования Борна—Йордана [14] и правило квантования Вейля—Маккоя [9, 10].

$$BJ\{q^m p^n \equiv p^n q^m\} \rightarrow \frac{1}{n+1} \sum_{k=0}^n \hat{p}^{n-k} \hat{q}^m \hat{p}^k, \quad (BJ)$$

$$WMC\{q^m p^n \equiv p^n q^m\} \rightarrow \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} \hat{p}^{n-k} \hat{q}^m \hat{p}^k. \quad (WMC)$$

Согласно этим правилам были вычислены квантовые аналоги классической нормальной формы $\hat{G}_6^{BJ}$ и $\hat{G}_6^{WMC}$. К примеру, можно получить следующие соотношения

$$BJ\{Q_\nu P_\nu\} = (\hat{Q}_\nu \hat{P}_\nu) + 1/2, \quad BJ\{(Q_\nu P_\nu)^2\} = (\hat{Q}_\nu \hat{P}_\nu)^2 + (\hat{Q}_\nu \hat{P}_\nu) + 3/2,$$

$$BJ\{(Q_\nu P_\nu)^3\} = (\hat{Q}_\nu \hat{P}_\nu)^3 + 7/4(\hat{Q}_\nu \hat{P}_\nu)^2 + 15/4(\hat{Q}_\nu \hat{P}_\nu) + 3/2,$$

$$WMC\{Q_\nu P_\nu\} = (\hat{Q}_\nu \hat{P}_\nu) + 1/2,$$

$$WMC\{(Q_\nu P_\nu)^2\} = (\hat{Q}_\nu \hat{P}_\nu)^2 + (\hat{Q}_\nu \hat{P}_\nu) + 1/2, \quad (19)$$

$$WMC\{(Q_\nu P_\nu)^3\} = (\hat{Q}_\nu \hat{P}_\nu)^3 + 3/2(\hat{Q}_\nu \hat{P}_\nu)^2 + 2(\hat{Q}_\nu \hat{P}_\nu) + 3/4 \text{ и т.д.}$$

Тогда для классической нормальной формы (18) получим квантовые аналоги:

$$\begin{aligned} \hat{G}_6^{BJ} = & \hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 1 + C_{41}[(\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 1)^2 + 5/2] + \\ & + C_{42}[\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 2(\hat{Q}_1 \hat{P}_1)(\hat{Q}_2 \hat{P}_2) + 1/2] + \\ & + C_{43}[(\hat{Q}_1 \hat{P}_1 - \hat{Q}_2 \hat{P}_2)^2 + 5/2] + \\ & + C_{61}[(\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 1)^3 + 1/4(\hat{Q}_1 \hat{P}_1)^2 + 1/4(\hat{Q}_2 \hat{P}_2)^2 + \\ & + 27/4(\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2) + 13/2] + \\ & + C_{64}[(\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 1)(\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 2\hat{Q}_1 \hat{P}_1 \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 3)] + \\ & + C_{66}[(\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 1)[(\hat{Q}_1 \hat{P}_1 - \hat{Q}_2 \hat{P}_2)^2 + \\ & + 1/4(\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2)] - 1/2\hat{Q}_1 \hat{P}_1 \hat{Q}_2 \hat{P}_2] \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \hat{G}_6^{WMc} = & \hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 1 + C_{41} \left[(\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 1)^2 + 1/2 \right] + \\ & + C_{42} \left[\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 2\hat{Q}_1 \hat{P}_1 \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 1/2 \right] + \\ & + C_{43} \left[(\hat{Q}_1 \hat{P}_1 - \hat{Q}_2 \hat{P}_2)^2 + 1/2 \right] + \\ & + C_{61} \left[(\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 1)^3 + 2\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + 2\hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 2 \right] - \\ & - C_{64} (\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 1) (\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 2\hat{Q}_1 \hat{P}_1 \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 1) + \\ & + C_{66} (\hat{Q}_1 \hat{P}_1 + \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 1) \left((\hat{Q}_1 \hat{P}_1)^2 + (\hat{Q}_2 \hat{P}_2)^2 - 2\hat{Q}_1 \hat{P}_1 \hat{Q}_2 \hat{P}_2 + 1 \right). \end{aligned} \quad (21)$$

Введем следующий ортонормированный базис векторов

$$|N, L\rangle = \left[\left(\frac{N-L}{2} \right)! \left(\frac{N+L}{2} \right)! \right]^{-1/2} \cdot \hat{Q}_2^{\left(\frac{N-L}{2} \right)} \cdot \hat{Q}_1^{\left(\frac{N+L}{2} \right)}, \quad (22)$$

$$\hat{P}_1|0,0\rangle = \hat{P}_2|0,0\rangle = 0,$$

где $N=0,1,2,\dots$ — главное квантовое число, L — орбитальное квантовое число, принимающее для данного N значения $L=\pm N, \pm(N-2), \pm(N-4), \dots$, для которых имеются соотношения

$$\hat{Q}_1 \hat{P}_1 |N, L\rangle_1 = (N+L)/2 |N, L\rangle, \quad \hat{Q}_2 \hat{P}_2 |N, L\rangle_1 = (N-L)/2 |N, L\rangle \quad (23)$$

Заметим, что базисные векторы $|N, L\rangle$ в полярных переменных $\langle r, \phi | N, L \rangle$ представляют вырожденную гипергеометрическую функцию.

Эти соотношения позволяют найти собственные значения квантовых аналогов нормальных форм $\hat{G}_6^{BJ}$ и $\hat{G}^{WMc}$, тем самым получить формулы для энергетических спектров E_{NL}^{BJ} , E_{NL}^{WMc} заданного гамильтониана (2.1). Эти формулы имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} E_{NL}^{BJ} = & N+1 + \frac{1}{2} C_{41} (2N^2 + 4N + 7) + \frac{1}{2} C_{42} (N^2 + 2N - L^2 + 1) + \\ & + \frac{1}{2} C_{43} (2L^2 + 5) + \frac{1}{8} C_{61} (8N^3 + 25N^2 + 78N + L^2 + 60) - \\ & - \frac{1}{2} C_{64} (N^3 + 3N^2 + 8N + L^2 - NL^2 - L^2 + 3) + \\ & + \frac{1}{8} C_{66} (N^2 + 14N + 8NL^2 + 9L^2 + 12), \\ E_{NL}^{WMc} = & N+1 + \frac{1}{2} C_{41} (2N^2 + 4N + 3) + \\ & + \frac{1}{2} C_{42} (N^2 + 2N - L^2 + 1) + \\ & + \frac{1}{2} C_{43} (2L^2 + 1) + C_{61} (N^3 + 3N^2 + 5N + 3) - \\ & - \frac{1}{2} C_{64} (N^3 + 3N^2 + 2N - NL^2 - L^2 + 1) + \\ & + C_{66} (N + NL^2 + L^2 + 1) \end{aligned} \quad (24)$$

К сожалению, расчетов энергетического спектра для системы (2.1) в литературе нет даже в случае ее интегрируемости при $c=4d$. Однако такие квантовые расчеты имеются в двух других случаях, для которых классическая система (2.1) является интегрируемой. Ниже для этих двух случаев представим результаты наших расчетов и проведем сравнения с имеющимися в литературе результатами других авторов.

Тем не менее, приведем результаты расчетов по формулам (24) и (25) при $c=4d$ для сравнения предсказаний спектра по двум правилам квантования.

Таблица 2

Сравнение нижних уровней энергии, полученных при квантовании классической нормальной формы по правилам Вейля-Маккоя и Борна-Йордана при значениях параметров ($b=0, c=0,02, d=0,005, c=4d$)

№	$E_{N,L}$	E_{NL}^{WMc}	E_{NL}^{BJ}	$E_{NL}^{BJ} - E_{NL}^{WMc}$
1.	$E_{0,0}$	1,015	1,028	0,013
2.	$E_{1,\pm 1}$	2,045	2,055	0,010
3.	$E_{2,\pm 2}$	3,089	3,095	0,006
4.	$E_{2,0}$	3,106	3,108	0,002
5.	$E_{3,\pm 3}$	4,147	4,147	0,000
6.	$E_{3,\pm 1}$	4,183	4,172	-0,010
7.	$E_{4,\pm 4}$	5,219	5,212	-0,007
8.	$E_{4,\pm 2}$	5,273	5,247	-0,026
9.	$E_{4,0}$	5,291	5,259	0,018

Для двух других случаев интегрируемости системы (2.1) формулы энергетических спектров имеют следующий вид:

2) при параметрах $b=c=0, d \neq 0$

$$E_{NL}^{BJ} = N+1 + d(3/2N^2 + 3N - 1/2L^2 + 4) - d^2(17/4N^3 + 13N^2 + 75/2N - 2L^2 - 9/4L^2N + 57/2), \quad (26)$$

$$E_{NL}^{WMc} = N+1 + d(3/2N^2 + 3N - 1/2L^2 + 2) - d^2(17/4N^3 + 51/4N^2 + 19N - 9/4L^2 - 9/4L^2N + 21/2), \quad (27)$$

3) при параметрах $b=0, c=-2d, d \neq 0$

$$E_{NL}^{BJ} = N+1 + d(9/8N^2 + 9/4N - 3/8L^2 + 3) - d^2(85/32N^3 + 1037/128N^2 + 1479/64N - 187/128L^2 - 51/32L^2N + 561/32), \quad (28)$$

$$E_{NL}^{WMc} = N+1 + d(9/8N^2 + 9/4N - 3/8L^2 + 3/2) - d^2(187/32N^3 + 561/32N^2 + 391/16N - 153/32L^2 - 153/32L^2N + 51/4), \quad (29)$$

Таблица 3

Сравнение уровней энергий, полученных по формулам (26), (27), с их значениями из работы [11] при $d=0,0005$

№	$2 \cdot E_{N,L}$	E_{NL}^{BJ}	E_{NL}^{WMc}	Из работы [11]
1.	$2E_{0,0}$	2,002	2,001493	2,0014973853462
2.	$2E_{1,\pm 1}$	4,006	4,00447	4,0044884408418
3.	$2E_{2,\pm 2}$	6,010	6,009	6,0104605654612
4.	$2E_{2,0}$	6,012	6,010	6,0074794963374
5.	$2E_{3,\pm 3}$	8,016	8,015	8,0194012847306
6.	$2E_{3,\pm 1}$	8,019	8,018	8,0134516209568
7.	$2E_{4,\pm 4}$	10,024	10,022	10,0312982587478
8.	$2E_{4,\pm 2}$	10,028	10,027	10,0223923402262
9.	$2E_{4,0}$	10,030	10,028	10,0194237455762
10.	$2E_{5,\pm 5}$	12,033	12,031	12,0461392708521

Таблица 4

Сравнение уровней энергий, полученных по формулам (28), (29), с их значениями из работы [15] при $b=0$, $c=-2d$, $d=0,000005$

№	$2 \cdot E_{N,L}$	E_{NL}^{BJ}	E_{NL}^{WMC}	Из работы [15]
1.	$2E_{0,0}$	2,00004	2,0000199995	2,00009999550022
2.	$2E_{1,\pm 1}$	4,00008	4,0000599979	4,000059998050135
3.	$2E_{2,\pm 2}$	6,00014	6,0001199946	6,000119994900454
4.	$2E_{2,0}$	6,00016	6,0001399946	6,000139993550605
5.	$2E_{3,\pm 3}$	82,0002	8,0001999892	—
6.	$2E_{3,\pm 1}$	8,00026	8,0002399856	8,000239985901665
7.	$2E_{4,\pm 4}$	10,00032	10,0002999808	—
8.	$2E_{4,\pm 2}$	10,00038	10,0003599741	10,00035997450361
9.	$2E_{4,0}$	1000040	10,000379971	10,00037997225402
10.	$2E_{5,\pm 5}$	12,00044	12000419969	—
11.	$2E_{5,\pm 3}$	12,00052	12,000499958	—
12.	$2E_{5,\pm 1}$	12,00056	12,0005399529	12,00053995335796
13.	$2E_{6,\pm 6}$	14,00058	14,000559953	—
14.	$2E_{6,\pm 4}$	14,00068	14,000659937	—
15.	$2E_{6,\pm 2}$	14,00074	14000719928	14,00071992861387
16.	$2E_{6,0}$	1400076	14,000739925	—

Таким образом, если классическая функция Гамильтона задана или приведена к виду (1), то при помощи процедуры нормализации с последующим ее квантованием возможно получить приближенные аналитические формулы для энергетического спектра с удовлетворительной точностью. Но при этом желательно из-за большого объема простых вычислений использовать известные компьютерные системы алгебраических преобразований, например, REDUCE, MAPLE и др.

1. Биркгоф Дж. Д. Динамические системы. Ижевск: Удмуртский университет, 1999. 408 с.
2. Gustavson F.G. On constructing Formal Integrals of a Hamiltonian system near an Equilibrium Point // Astronomical Journal. 1966. Vol. 71. №8. P. 670-686.
3. Henon M., Heiles C. The applicability of the third integral of motion: some numerical experiments // Astronomical Journal 1964. Vol. 69. №1. P. 73-79.
4. Джакаля Г.Е.О. Методы теории возмущений для нелинейных систем. М.: Наука, 1979. 321 с.
5. Найфэ А.Х. Методы возмущений. М.: Мир, 1976. 456 с.
6. Маркеев А.П. Точки либрации в небесной механике и космодинамике. М.: Наука, 1978. 312 с.
7. Чеканов Н.А. Квантование нормальной формы Биркгофа—Густавсона // Ядерная физика. 1989. Т. 50. Вып. 8. С. 344-346.
8. Basios V., Chekanov N.A., Markovski B.L. et al. GITA: a REDUCE program for the normalization of polynomial Hamiltonians // Comp. Phys. Commun. 1995. V. 90. P. 355-368.

9. Вейль Г. Теория групп и квантовая механика. М.: Наука, 1986. 496 с. (см. гл. IV, параграф 14).
10. McCoy N.H. On the function in quantum mechanics which corresponds to a given function in classical mechanics // Proc. Natl Acad. Sci. USA. 1932. V. 18(11). P. 674-676.
11. Banerjee K. General anharmonic oscillator // Proc. of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. 1978. V. 364. Issue 1717. P. 265-275.
12. Чеканов Н.А., Кириченко И.К., Богачев В.Е., Чеканова Н.Н. Компьютерные расчеты динамических свойств для одной модели классической системы с двумя степенями свободы // Научные ведомости БелГУ. Сер.: Экономика. Информатика. 2014. №1(172). Вып. 29/1. С. 94-99.
13. Razavy M. Heisenberg's quantum mechanics. Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2011. 678 p.
14. Борн М., Йордан П. О квантовой механике // УФН. 1977. №122. Вып. 8. С. 586-611.
15. Taseli H. On the Exact Solution of the Schrodinger Equation with a Quartic Anharmonicity // International Journal of Quantum Chemistry, 1996. Vol. 57. P. 63-71.

References

1. Birkhoff G.D. Dynamical systems. American Mathematical Society, 1966, 305 p. (Rus. ed.: Dinamicheskie sistemy. Moscow-Izhevsk, NITs 'Regulyarnaya i khaoticheskaya dinamika' Publ., 2002, 406 p.).
2. Gustavson F.G. On constructing Formal Integrals of a Hamiltonian system near an Equilibrium Point. Astronomical Journal, 1966, vol. 71, no. 8, pp. 671-686.
3. Hénon M., Heiles C. The applicability of the third integral of motion: some numerical experiments. Astron. Jour., 1964, vol. 69, no. 1, pp. 73-79.
4. Giacaglia G.E.O. Perturbation Methods in Non-Linear Systems. Springer, 1972, 378 p. (Rus. ed.: Metody teorii vozmushcheniy dlya nelineynykh sistem. Moscow, Nauka Publ., 1979, 320 p.).
5. Ali H. Nayfeh. Introduction to Perturbation Techniques. Wiley, New York, 1981. (Rus. ed.: Metody vozmushcheniy. Moscow, Mir Publ., 1976, 456 p.).
6. Markeev A.P. Tochki libratsii v nebesnoy mekhanike i kosmodinamike [Libration points in celestial mechanics and astrodynamics]. Moscow, Nauka, Publ., 1978, 312 p.
7. Chekanov N. A. Kvantovanie normal'noy formy Birkgofo-Gustavsona [Quantization of Birkhoff-Gustavson Normal Form]. Yadernaya fizika, 1989, vol. 50, iss. 8, pp. 344-346.
8. Basios V., Chekanov, B.L. Markovski, V.A. Rostovtsev, S.I. Vinitsky GITA: a REDUCE program for the normalization of polynomial Hamiltonians. Comp. Phys. Commun., 1995, vol. 90, pp. 355-368.
9. Veyl' G. Teoriya grupp i kvantovaya mekhanika [Group Theory and Quantum Mechanics]. Moscow, Nauka Publ., 1986, 496 p. (see ch. IV, paragraph 14).
10. McCoy N.H. On the function in quantum mechanics which corresponds to a given function in classical mechanics. Proc. Natl Acad. Sci. USA, 1932, vol. 18, pp. 674-676.
11. Banerjee K. General anharmonic oscillator. Proc. R. Soc., 1978, vol. A364, pp. 265-275.
12. N.A. Chekanov, I.K. Kirichenko, V.E. Bogachev, N.N. Chekanova. Komp'yuternye raschety dinamicheskikh svoystv dlya odnoy modeli klassicheskoy sistemy s dvumya stepenyami svobody [Computer calculations of dynamic properties for one model of classical system with two degrees of freedom]. Nauchnye vedomosti BelGU, ser. Informatika, 2014, no. 1(172), iss. 29/1, pp. 94-99.
13. Razavy M. Heisenberg's quantum mechanics. Singapore, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2011, 678 p.
14. Born M., P. Jordan Zur Quantenmechanik. Zeits. fur Phys., 1925, vol. 34, pp. 858-888 (Rus. ed.: O kvantovoy mekhanike. UFN, 1977, no. 122, iss. 8, pp. 586-611).
15. Taseli H. On the Exact Solution of the Schrodinger Equation with a Quartic Anharmonicity. International Journal of Quantum Chemistry, 1996, vol. 57, pp. 63-71.