УДК 51-72.530.145 *Краткое сообщение*

ПОЛУКЛАССИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ И ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ГАМИЛЬТОНОВЫХ СИСТЕМ С ОДНОЙ И НЕСКОЛЬКИМИ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ НА ОСНОВЕ МЕТОДА КЛАССИЧЕСКИХ И КВАНТОВЫХ НОРМАЛЬНЫХ ФОРМ

И.Н. Беляева[1], Н.И. Корсунов[1], Н.А. Чеканов[1], А.Н. Чеканов[2]
[1]*ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»*
308015, Россия, Белгород, ул. Победы, 85
[2]*ФГКОУ ВО «Белгородский юридический институт МВД РФ им. И. Д. Путилина»*
308002, Россия, Белгород, ул. Горького, 71
ibelyaeva@bsu.edu.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.255

Аннотация: В работе изложены две схемы последовательного построения классической нормальной формы и её квантового аналога для некоторых классов классических гамильтоновых систем. Для квантовых нормальных форм указан способ решения их задачи на собственные значения. На основе этих нормальных форм предложен полуклассический метод решения уравнений Шрёдингера для классических гамильтоновых систем при их квантовом рассмотрении. Предложенным методом были решены некоторые квантовые задачи и обнаружено, что этот метод дает очень точное предсказание для энергетических уровней. Однако эта точность в области существования классического хаоса ухудшается. Этим же полуклассическим методом решена квантовая задача для плоского атома водорода в однородном магнитном поле. Предложенный метод допускает проведение всех расчетов с применением современных компьютерных систем аналитических вычислений.

Ключевые слова: классическая нормальная форма, квантовый аналог нормальной формы, правило Вейля-Маккоя, уровни энергий, собственные функции, математическое моделирование.

1. Введение

Одним из эффективных методов решения, к примеру дифференциальных уравнений, является их предварительное преобразование к более простому виду (см., например, [1]).

И известно также, что при расчетах квантовых характеристик различных систем можно использовать соответствующие классические уравнения и их методы решения (см., например, [2]), где, в частности, сообщается, что «Вся информация, следующая из классической теории может таким образом использована в новой теории».

В классической механике широкое применение получил метод нормальных форм [3-9], который был также широко и успешно использован в квантовой механике [10-11].

В настоящей работе метод нормальных форм применяется для двух классов гамильтоновых систем. В частности, для этих классов были разработаны и представлены конкретные алгоритмы для практического построения классических нормальных форм совместно с построением их квантовых аналогов. Эти алгоритмы были применены к некоторым частным гамильтоновым системам. Из квантовых нормальных форм получены формулы в явном аналитическом виде для расчета энергетических уровней. Результаты вычислений по полученным формулам сравнены с имеющимися в литературе данными и получено очень удовлетворительное согласие Кроме того, квантовая нормальная форма дает информацию и о волновых функциях для этих уровней энергии.

2. Методология исследований

Рассмотрим классические системы с n степенями свободы, функция Гамильтона которых имеет вид

$$H(q,p)=H^{(2)}+\sum_{s\geq 3}H^{(s)}(q,p)\,,\; H^{(2)}=\sum_{k=1}^{n}\frac{\omega_k}{2}(q_k^2+p_k^2) \tag{1}$$

q, p – n-мерные канонически сопряженные переменные, $H^{(s)}(q,p)$ – однородный полином степени s. Исходная функция Гамильтона $H(q,p)$ приводится к своей нормальной форме $\Gamma(\xi,\eta)$ с помощью канонического преобразования $(\xi,\eta)\to(q,p)$ с производящей функцией

$$F(q,n)=q\cdot n+W(q,n)\,,\; \xi=q+\frac{\partial W}{\partial\eta}\,,\; p=\eta+\frac{\partial W}{\partial q}\,,\; F(q,\eta)=\Gamma(\xi,\eta)\,. \tag{2}$$

Функция $\Gamma(\xi,\eta)$ является нормальной формой, если выполняется равенство:

$$D(\xi,\eta)\Gamma(\xi,\eta)\equiv 0\,,\; D(\xi,\eta)=\sum_{k=1}^{m}\omega_k\left(\xi_k\frac{\partial}{\partial\eta_k}-\eta_k\frac{\partial}{\partial\xi_k}\right). \tag{3}$$

Оператор нормальной формы $D(\xi,\eta)$ может записан посредством скобки Пуассона в виде $D(\xi,\eta)=\left\{H^{(2)},\Gamma(\xi,\eta)\right\}$. Из соотношений (2) можно получить следующее основное уравнение

$$DW^{(s)}(q,\eta)=-H^{(s)}(q,\eta)+\Gamma^{(s)}(q,n)\,, \tag{4}$$

в котором верхние индексы указывают степень однородности соответствующих величин по переменным (q,η).

Из основного уравнения (4) находим нормальную форму $\Gamma^{(s)}(q,n)$ и функцию $W^{(s)}(q,\eta)$ в виде однородных полиномов степени s. Для этого временно делается подстановка к новым комплексным переменным $q=(x+iy)/\sqrt{2}$, $n=(x-iy)/\sqrt{2}$, в которых оператор нормальной формы является диагональным

$$D(x,y)=\sum_{k=1}^{m}\omega_k\left(x_k\frac{\partial}{\partial x_k}-y_k\frac{\partial}{\partial y_k}\right) \tag{5}$$

и однородные мономы вида $\Phi^{(s)}(x,y)=x_1^{l_1}\cdot x_2^{l_2}\cdot y_1^{m_1}\cdot y_2^{m_2}$ являются собственными мономами для оператора (5). Тогда, представляя моном нормальной формы в виде суммы $\Gamma^{(s)}(x,y)=R^{(s)}(x,y)+N^{(s)}(x,y)$, где $D(x,y)N^{(s)}(x,y)=0$, находим саму нормальную форму, а из основного уравнения $DW^{(s)}(x,y)=-H^{(s)}(x,y)+R^{(s)}(x,y)$ находим $W^{(s)}(x,y)$. Возвращаясь от временных переменных (x,y) к исходным, получаем нормальную форму и производящую функцию. Однако указанные вычисления вовлекают огромное число полиномов, реально десятки, сотни и даже более в зависимости от максимального значения степени s. Поэтому естественно для приведения процедуры нормализации использовать современные системы аналитических вычислений. В частности, нами была использована известная система REDUCE[8]. Для построения квантового аналога классическую нормальную форму $\Gamma(\xi,\eta)$ представим в комплексных канонически сопряженных переменных:

$$z=\frac{\eta+i\xi}{\sqrt{2}},\quad \bar{z}=\frac{\eta-i\xi}{\sqrt{2}} \tag{6}$$

Тогда классическая нормальная форма будет представлена в следующем виде $\Gamma(z,\bar{z})=\sum_k (z\cdot\bar{z})^k$, а её квантовый аналог получаем с помощью известного правила сопоставления Вейля-Маккоя классическим мономам $(z\cdot\bar{z})^k$ их квантовым операторам соответствуют операторы

$$WMc\left\{\bar{z}^n\cdot z^m\equiv z^m\cdot\bar{z}^n\right\}\Rightarrow\frac{1}{2}\sum_{l=0}^{m}(\hat{a}^+)^l\cdot\hat{a}^n\cdot(\hat{a}^+)^{(m-l)} \tag{7}$$

Операторы рождения и уничтожения определяются по формулам:

$$\hat{a}^+=\frac{1}{i\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi}-\xi\right),\ \hat{a}=\frac{1}{i\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right),\ \hat{a}\cdot\hat{a}^+-\hat{a}^+\cdot\hat{a}=1. \tag{8}$$

В результате квантовая нормальная форма будет выражена посредством известного оператора $\hat{N}\equiv\hat{a}^+\cdot\hat{a}$.Таким образом будет построена квантовая нормальная форма $\hat{\Gamma}$ для начального гамильтониана (1) и, следовательно, она представляет оператор Шрёдингера для исходной классической системы (1).

2. Результаты исследований

По изложенному выше алгоритму была рассмотрена классическая функция Гамильтона для ангармонических осцилляторов

$$H(q,p)=H^{(2)}(q,p)+H^{(\mu)}=\frac{1}{2}(p^2+q^2)+\alpha q^\mu,\ \mu=4,\ 6,\ 8, \tag{9a}$$

которая при квантовомеханическом описании приводит к следующему уравнению Шрёдингера

$$\left(-\frac{d^2}{2dq^2}+\frac{q^2}{2}+\alpha q^{\mu}-E\right)\psi(q)=0,\ \mu=4,\ 6,\ 8. \qquad (9б)$$

Ниже приведем полученные результаты для классической Γ_{12} и квантовой $\hat{\Gamma}_{12}$ нормальных форм в случае $\mu=4$ до максимальной степени $S_{\max}=12$:

$$\Gamma_{12}=(z\bar{z})+\frac{3}{8}\alpha(z\bar{z})^2-\frac{17}{32}\alpha^2(z\bar{z})^3+\frac{375}{256}\alpha^3(z\bar{z})^4-\frac{10689}{2048}\alpha^4(z\bar{z})^5+\frac{87549}{4096}\alpha^5(z\bar{z})^6-\ldots \qquad (10)$$

$$\begin{aligned}\hat{\Gamma}_{12}&=\hat{N}+\frac{1}{2}+\frac{3}{2}\alpha\left(\hat{N}^2+\hat{N}+\frac{1}{2}\right)-\frac{17}{4}\alpha^2\left(\hat{N}^3+\frac{3}{2}\hat{N}^2+2\hat{N}+\frac{3}{4}\right)+\frac{375}{16}\alpha^3\left(\hat{N}^4+\right.\\&\left.+2\hat{N}^3+5\hat{N}^2+4\hat{N}+\frac{3}{2}\right)-\frac{10689}{64}\alpha^4\left(\hat{N}^5+\frac{5}{2}\hat{N}^4+10\hat{N}^3+\frac{25}{2}\hat{N}^2+\frac{23}{2}\hat{N}+\frac{15}{4}\right)+\ldots\end{aligned} \qquad (11)$$

Квантовая нормальная форма (11) является полуклассичеким приближением к соответствующему уравнению (3) и возникает задача на собственные значения для (11).

Таким образом, будет построена квантовая нормальная форма $\hat{\Gamma}$ для начального гамильтониана (1) и, следовательно, она представляет оператор Шрёдингера для исходной классической системы (1). Следовательно, решение уравнения Шрёдингера в полуклассическом приближении находится из следующего уравнения

$$\hat{\Gamma}_{12}\Phi(q)=\lambda\Phi(q). \qquad (12)$$

Так как скобка Пуассона для $\{H^{(2)},\Gamma\}=0$, то операторы $\hat{H}^{(2)}$ и $\hat{\Gamma}\sim\hat{N}$ коммутируют и имеют общие собственные функции, то есть уравнению (9б) удовлетворяют полиномы Чебышева-Эрмита $H_n(q)$, а собственные значения $\lambda=E_n$ легко находятся из выражения (11):

$$E_n=n+\frac{1}{2}+\frac{3}{2}\alpha\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right)-\frac{17}{4}\alpha^2\left(n^3+\frac{3}{2}n^2+2n+\frac{3}{4}\right)+\frac{375}{16}\alpha^3\left(n^4+2n^3+5n^2+4n+\frac{3}{2}\right)+\ldots \qquad (13)$$

Итак, полиномы Чебышева-Эрмита $H_n(q)$ и собственные числа (10) есть решение уравнения Шрёдингера для ангармонического осциллятора с $\mu=4$. Аналогично были получены решения для осцилляторов с $\mu=6{,}8$. Полученные уровни энергии при разных α были сравнены с имеющимися достаточно точными их значениями из работы[12], которые согласуются с нашими с точностью 10^{-3} – 10^{-4}%.

Ниже кратко изложим вторую схему построения классической нормальной формы и её квантового аналога для другого класса классических систем, функция Гамильтона которых может быть представлена в виде:

$$H(q,p)=\frac{1}{2}\left(p_1^2+q_1^2+p_2^2+q_2^2\right)+H^{(3)}(q,p)+H^{(4)}(q,p)+\ldots \qquad (14)$$

Т.е. описывает гамильтонову систему с двумя степенями свободы и равными частотами $\omega_1 = \omega_2$. Основные этапы построения этих величин такие же, как и в изложенной ранее первой схемы. Однако для системы (11) сперва делается каноническое преобразование с валентностью равной мнимой единицей $c = i$ $(q, p) \to (Q, P)$:

$$q_1 = \frac{1}{2i}\left(-Q_1 + Q_2 + P_1 - P_2\right),\ q_2 = \frac{1}{2}\left(Q_1 + Q_2 + P_1 + P_2\right),$$

$$p_1 = \frac{1}{2}\left(Q_1 - Q_2 + P_1 - P_2\right),\ p_2 = \frac{1}{2i}\left(Q_1 + Q_2 - P_1 - P_2\right), \tag{15а}$$

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

$$P_1 = \frac{1}{2}\left(q_2 + ip_2\right) - \frac{i}{2}\left(q_1 + ip_1\right),\ P_2 = \frac{1}{2}\left(q_2 + ip_2\right) + \frac{i}{2}\left(q_1 + ip_1\right). \tag{15б}$$

В новых переменных (Q, P) функцию Гамильтона (14) запишем в виде

$$H(Q,P) = H^{(2)}(Q,P) + \sum_{j\ge 3} H^{(j)}(Q,P),\ H^{(2)}(Q,P) = i\left(Q_1P_1 + Q_2P_2\right). \tag{16}$$

Нормализация функции Гамильтона (16) выполняется каноническим преобразованием $(Q, P) \to (\xi, \eta)$ при помощи производящей функции:

$$F(Q,\eta) = Q\cdot\eta + \sum_{s=3}^{s=S_{\max}} W^{(s)}(Q,\eta), \tag{17}$$

получаем нормальную форму $\Gamma(\xi,\eta)$, которая удовлетворяет известному условию – занулению скобки Пуассона $D(\xi,\eta)\Gamma(\xi,\eta) = 0$, $D(\xi,\eta) = \left\{H^{(2)}, \Gamma(\xi,\eta)\right\}$. Все этапы нормализации, как и в первой схеме проводятся при помощи программы символьных вычислений [8]. В результате получаем классическую нормальную форму, которая зависит от двух комбинаций $\hat{A}_1 = \hat{\xi}_1\hat{\eta}_1$ и $\hat{A}_2 = \hat{\xi}_2\hat{\eta}_2$. Для получения квантовой нормальной формы $\eta \to \hat{\eta}$, $\xi \to \hat{\xi}$ применяем правило квантования Вейля-Маккоя в виде:

$$\eta^n\xi^m \equiv \xi^m\eta^n \Rightarrow \frac{1}{2^n}\sum_{l=0}^{n}\frac{n!}{l!(n-l)!}\hat{\eta}^l\cdot\hat{\xi}^m\cdot\hat{\eta}^{(n-l)},\ \hat{\eta}_\nu\cdot\hat{\xi}_\mu - \hat{\xi}_\nu\cdot\hat{\eta}_\mu = \delta_{\mu\nu}. \tag{18}$$

Заметим, что собственными функциями операторов $\hat{H}^{(2)}$ и $\hat{\Gamma}$ являются векторы

$$|N,L\rangle = \left[\left(\frac{N+L}{2}\right)!\cdot\left(\frac{N-L}{2}\right)!\right]^{(-1/2)}\left(\hat{\xi}_1\right)^{\left(\frac{N-L}{2}\right)}\cdot\left(\hat{\xi}_1\right)^{\left(\frac{N+L}{2}\right)}|0,0\rangle,\ \hat{\eta}_1|0,0\rangle = \hat{\eta}_2|0,0\rangle = 0, \tag{19}$$

$$N = 0,1,2,\ldots,\ L = \pm N,\ \pm(N-2),\ \pm(N-4),\ \ldots,\ 1(0).$$

В координатном представлении векторы (19) выражаются через вырожденную гипергеометрическую функцию.

Пример. Квадрупольные колебания поверхности атомного ядра описываются следующей функцией Гамильтона [18]:

$$H=\frac{1}{2}\left(p_1^2+q_1^2+p_2^2+q_2^2\right)+b\left(q_1^2\cdot q_2-\frac{1}{3}q_2^3\right)+c\left(q_1^2+q_2^2\right)^2. \qquad (20)$$

Следуя описанной выше второй схеме, вычисляем классическую нормальную форму:

$$\Gamma(\xi,\eta)=i\left\{(\xi_1\eta_1+\xi_2\eta_2)+\frac{b^2}{6}\left((\xi_1\eta_1)^2+(\xi_2\eta_2)^2-12\xi_1\eta_1\xi_2\eta_2\right)+c\left((\xi_1\eta_1)^2+(\xi_2\eta_2)^2+4\xi_1\eta_1\xi_2\eta_2\right)\right\} \qquad (21)$$

и квантовую нормальную форму

$$\begin{gathered}\hat{\Gamma}=\hat{\xi}_1\hat{\eta}_1+\hat{\xi}_2\hat{\eta}_2+1+\frac{b^2}{6}\left[\left(\hat{\xi}_1\hat{\eta}_1\right)^2+\left(\hat{\xi}_2\hat{\eta}_2\right)^2-5\hat{\xi}_1\hat{\eta}_1-5\hat{\xi}_2\hat{\eta}_2-12\hat{\xi}_1\hat{\eta}_1\hat{\xi}_2\hat{\eta}_2-2\right]+\\+c\left[\left(\hat{\xi}_1\hat{\eta}_1\right)^2+\left(\hat{\xi}_2\hat{\eta}_2\right)^2+3\hat{\xi}_1\hat{\eta}_1+3\hat{\xi}_2\hat{\eta}_2+4\hat{\xi}_1\hat{\eta}_1\hat{\xi}_2\hat{\eta}_2+2\right].\end{gathered} \qquad (22)$$

Так как базисные векторы (19) являются собственными для каждого члена (22), то получаем следующую аналитическую формулу для спектра исходного гамильтониана – квадрупольных колебаний поверхности ядра:

$$E(N,L)=N+1+\frac{b^2}{12}\left[7L^2-5(N+1)^2+1\right]+\frac{c}{2}\left[3(N+1)^2-L^2+1\right]. \qquad (23)$$

Уровни энергии, вычисленные по формуле (23) отличаются от результатов, вычисленных методом диагонализации точного уравнения Шрёдингера примерно на процент от среднего расстояния между соседними уровнями. Таким образом, полуклассическая формула (23) является достаточно точной.

Изложенный метод нормальных форм применим, например, для функции Гамильтона с наличием сингулярности в начале координат. Рассмотрим плоский атом водорода в постоянном однородном магнитном поле, функция Гамильтона которого в атомных единицах имеет вид:

$$H(x,y,p_x,p_y)=\frac{1}{2}\left(p_x^2+p_y^2\right)+\frac{\gamma}{2}\left(xp_y-yp_x\right)-\frac{1}{\sqrt{x^2+y^2}}+\frac{\gamma^2}{8}\left(x^2+y^2\right). \qquad (24)$$

Здесь $\gamma=B/2{,}3\cdot10^5$. Значение коэффициента в знаменателе в [Тл].

Используя известное в небесной механике преобразование Леви-Чивита для переменных и времени $(x,y,p_x,p_y)\to(q_1,q_2,p_1,p_2)$ и $t\to\tau$:

$$x=\frac{q_1^2-q_2^2}{\sqrt{-2E}},\ y=\frac{q_1q_2}{\sqrt{-2E}},\ p_x=\frac{q_1p_1-q_2p_2}{q_1^2+q_2^2}\cdot\sqrt{-2E},\ p_y=\frac{p_1q_2-p_2q_1}{q_1^2+q_2^2}\cdot\sqrt{-2E},$$

$$\frac{dt}{d\tau}=r\big/\sqrt{-2E},\ r=\sqrt{x^2+y^2}. \qquad (25)$$

Здесь полная энергия $E<0$. После преобразования (25) получаем следующий гамильтониан:

$$\begin{gathered}H(q_1,q_2,p_1,p_2)=\frac{1}{2}\left(p_1^2+q_1^2\right)+\frac{1}{2}\left(p_2^2+q_2^2\right)+\frac{\beta}{8}(q_1p_2-q_2p_1)\left(q_1^2+q_2^2\right)+\\+\frac{\beta^2}{128}\left(q_1^2+q_2^2\right)^3-\sqrt{-\frac{2}{E}},\ \beta=\gamma/(-E).\end{gathered} \qquad (26)$$

При этом имеет место равенство $H\left(q_1,q_2,p_1,p_2\right)=\sqrt{-2/E}$.

Вычисленная классическая нормальная форма согласно второй схеме до степени $S_{\max}=10$ равна:

$$\begin{gathered}\Gamma_{10}\left(\xi,\eta\right)=i\left(\eta_1\xi_1+\eta_2\xi_2\right)+\frac{i}{8}\beta\left[\eta_2^2\xi_2^2-\eta_1^2\xi_1^2\right]+\frac{5i}{64}\beta^2\left[\eta_1^2\xi_1^2\eta_2\xi_2+\eta_1\xi_1\eta_2^2\xi_2^2\right]+\\+\frac{i}{512}\beta^3\left[-\eta_2^4\xi_2^4-13\eta_1\xi_1\eta_2^3\xi_2^3-13\eta_1^3\xi_1^3\eta_2\xi_2+\eta_1^4\xi_1^4\right]+\\+\frac{i}{2048}\beta^4\left[\eta_2^5\xi_2^5+\frac{27}{8}\eta_1\xi_1\eta_2^4\xi_2^4-\frac{107}{2}\eta_1^2\xi_1^2\eta_2^3\xi_2^3-\frac{107}{2}\eta_1^3\xi_1^3\eta_2^2\xi_2^2+\frac{27}{8}\eta_1^4\xi_1^4\eta_2\xi_2+\eta_1^5\xi_1^5\right],\end{gathered}\tag{27}$$

квантовый аналог которой равен:

$$\begin{gathered}\hat{\Gamma}_{10}\left(\xi,\eta\right)=\hat{A}_1+\hat{A}_2+1+\frac{1}{8}\beta\left[-\hat{A}_1^2+\hat{A}_2^2-\hat{A}_1+\hat{A}_2\right]+\\+\frac{5}{256}\beta^2\left[4\hat{A}_1^2\hat{A}_2+2\hat{A}_1^2+4\hat{A}_1\hat{A}_2^2+8\hat{A}_1\hat{A}_2+3\hat{A}_1-2\hat{A}_2^2+3\hat{A}_2+1\right]+\\+\frac{1}{2048}\beta^3\left[4\hat{A}_1^4+52\hat{A}_1^3\hat{A}_2+34\hat{A}_1^3+78\hat{A}_1^2\hat{A}_2+59\hat{A}_1^2-52\hat{A}_1\hat{A}_2^3-78\hat{A}_1\hat{A}_2^2+29\hat{A}_1-4\hat{A}_2^4-34\hat{A}_2^3-59\hat{A}_2^2-29\hat{A}_2\right].\end{gathered}\tag{28}$$

Здесь для операторов $\hat{A}_1\equiv\hat{\eta}_1^+\hat{\eta}_1$, $\hat{A}_2\equiv\hat{\eta}_2^+\hat{\eta}_2$ собственными векторами являются векторы (19), причем $\hat{\eta}_k^+=\hat{\xi}_k$, $k=1,2$, но для однозначности волновой функции квантовые числа надо выбрать как $N=2n$, $L=2l$, поэтому собственные значения квантовой нормальной формы $\hat{\Gamma}_{10}\left|\lambda\right\rangle=\lambda\left(E\right)\left|\lambda\right\rangle$ можно вычислить, и они будут равны:

$$\begin{gathered}\lambda\left(E_{nl}\right)=2n+1-\frac{\beta}{4}\left(2n+l\right)+\frac{5}{128}\beta^2\left(-4l^2n-2l^2+4n^3+6n^2+4n+1\right)+\frac{1}{1024}\beta^3\left(l-\right.\\\left.-88l^2n-44l^2+120n^3+108n^2+118n+29\right)+\frac{1}{32768}\beta^4\left(-1876l^4n-938l^4+3960l^2n^3+\right.\\\left.+5940l^2n^2+4168l^2n+1094l^2-1572n^5-3930n^4-5880n^3-4890n^2-2250n-441\right).\end{gathered}\tag{29}$$

В силу соотношения (26) спектр плоского атома водорода в магнитном поле вычисляется из алгебраического уравнения:

$$\lambda\left(E_{nl}\right)=\sqrt{-2/E_{nl}},\ n=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \ldots;\ l=\pm n,\ \pm\left(n-1\right).\tag{30}$$

3. Заключение

В представленной работе процедура нормализации гамильтоновой функции для произвольного конечного числа степеней свободы, известная в классической механике, была применена для получения нормальной формы некоторых конкретных гамильтоновых систем, при этом нормальная форма имеет полиномиальный вид по канонически сопряженным переменным. Для получения квантового аналога полученных нормальных форм может быть использовано известное правило соответствия Вейля-Маккоя. В результате находятся в полуклассическом приближении в явном виде уровни энергии и волновые функции исходного уравнения Шредингера. Результаты вычислений уровней энергии были сравнены с имеющимися в литературе данными и получено очень хорошее согласие. Такое полуклассическое приближение было применено к системам, для которых функция Гамильтона имеет сингулярность в начале координат, в частности, в работе был исследован плоский атом водорода в однородном постоянном магнитном поле.

Библиографический список:

1. **Арнольд, В.И.** Дополнительные главы теории обыкновенных уравнений / В.И. Арнольд. – М.: Наука, 1978. – 304 с.
2. **Дирак, П.А.М.** К созданию квантовой теории поля: основные статьи 1925-1958 годов / П.А.М. Дирак; пер. с анг. и фр. под ред. Б.В. Медведева. – М.: Наука, 1990. – 368 с.
3. **Джакалья, Г.Е.О.** Методы теории возмущений для нелинейных систем / Г.Е.О. Джакалья; пер. с анг. под ред. А.П. Маркеева. – М.: Наука, 1979. – 320 с.
4. **Гребеников, Е.А.** Метод усреднения в прикладных задачах / Е.А. Гребеников. – М.: Наука, 1986. – 256 с.
5. **Маркеев, А.П.** Точки либрации в небесной механике и космодинамике / А.П. Маркеев. – М.: Наука, 1978. – 312 с.
6. **Биркгофф, Дж.Д.** Динамические системы / Дж.Д. Биркгофф. – Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2002. – 406 с.
7. **Богачев, В.Е.** MAPLE программа вычисления нормальной формы Биркгофа-Густавсона и независимых интегралов движения для гамильтоновой системы с произвольным числом степеней свободы / В.Е. Богачев, Н.А. Чеканов. Зарегистрировано в Отраслевом фонде алгоритмов и программ. – М.: ВНТИЦ, 2011. – №2011616109.
8. **Basios, V.** GITA: A REDUCE program for the normalization of polynomial Hamiltonian / V. Basios, N.A. Chekanov, B.L. Markovski, V.A. Rostovtsev, S.I. Vinitsky // Computer Physics Communications. – 1995. – V. 90. I. 2-3.– P. 355-368. DOI: 10.1016/0010-4655(95)00080-Y.
9. **Лихтенберг, А.** Регулярная и стохастическая динамика / А. Лихтенберг, М. Либерман. – М.: Мир, 1984. –528 с.
10. **Gustavson, F.G.** On constructing formal integrals of a Hamiltonian systems near an equilibrium point / F.G. Gustavson // The Astronomical Journal. – 1966. – V.71. – № 8. – P. 670-686. DOI: 10.1086/110172.
11. **Swimm, R.T.** Semiclassical calculations of vibrational energy levels for nonseparable systems using Birkhoff-Gustavson normal form / R.T. Swimm, J.B. Delos // The Journal of Chemical Physics. – 1979. – V. 71. – I. 4. – P. 1706-1717. DOI: 10.1063/1.438521.
12. **Banerjee, K**. General anharmonic oscillators / K. Banerjee // Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences. – 1978. – V. 364. – I. 1717. – P. 265-275. DOI: 10.1098/rspa.1978.0200.

References:

1. Arnold V.I. *Dopolnitel'nye glavy teorii obyknovennykh uravnenij* [Additional chapters in the theory of ordinary equations], Moscow, Nauka Publ., 1978, 304 p. (In Russian).
2. Dirak P.A.M. *K sozdaniyu kvantovoj teorii polya: osnovnye stat'i 1925-1958 godov* [Toward the creation of a quantum field theory: main papers 1925-1958], trans. and ed. by B.V. Medvedev, Moscow, Nauka Publ., 1990, 368 p. (In Russian).
3. Giacaglia G.E.O. *Perturbation Methods in Non-Linear Systems*, New York, Springer, 1972, IX, 369 p. DOI: 10.1007/978-1-4612-6400-2.
4. Grebenikov E.A. *Metod usredneniya v prikladnykh zadachakh* [Averaging method in applied problems], Moscow, Nauka Publ., 1986, 256 p. (In Russian).
5. Markeev A.P. *Tochki libratsii v nebesnoj mekhanike i kosmodinamike* [Libration points in celestial mechanics and cosmodynamics], Moscow, Nauka Publ., 1978, 312 p. (In Russian).
6. Birkhoff G.D. *Dynamical systems*, Providence, Rhode Island, American Mathematical Society, 1927, 305 p.
7. Bogachev V.E., Chekanov N.A. *MAPLE programma vychisleniya normalnoj formy Birkgofa-Gustavsona i nezavisimyh integralov dvizheniya dlya gamiltonovoj sistemy s proizvolnym chislom stepenej svobody [MAPLE program for calculating the Birkhoff-Gustavson normal form and independent integrals of motion for a*

Hamiltonian system with an arbitrary number of degrees of freedom], Moscow, The All-Russian Scientific and Technical Information Center, 2011, no. 2011616109. (In Russian).
8. Basios V., Chekanov N.A., Markovski B.L., Rostovtsev V.A., Vinitsky S.I. GITA: A REDUCE program for the normalization of polynomial Hamiltonian, *Computer Physics Communications*, 1995, V. 90, issue 2-3, pp. 355-368. DOI: 10.1016/0010-4655(95)00080-Y.
9. Lichtenberg A.J., Lieberman M.A. *Regular and chaotic dynamics*, New York, Heidelberg, Berlin, Springer-Verlag, 499 p.
10. Gustavson F.G. On constructing formal integrals of a Hamiltonian systems near an equilibrium point, *The Astronomical Journal*, 1966, V.71, no. 8, pp. 670-686. DOI: 10.1086/110172.
11. Swimm R.T., Delos J.B. Semiclassical calculations of vibrational energy levels for nonseparable systems using Birkhoff-Gustavson normal form, *The Journal of Chemical Physics*, 1979, vol. 71, issue 4, pp. 1706-1717. DOI: 10.1063/1.438521.
12. Banerjee K. General anharmonic oscillators, *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 1978, vol. 364, issue 1717, pp. 265-275. DOI 10.1098/rspa.1978.0200.

Short Communication

SEMI-CLASSICAL CALCULATIONS OF ENERGY LEVELS AND WAVE FUNCTIONS OF HAMILTONIAN SYSTEMS WITH ONE AND SEVERAL DEGREES OF FREEDOM BASED ON THE METHOD OF CLASSICAL AND QUANTUM NORMAL FORMS

I.N. Belyaeva[1], N.I. Korsunov[1], N.A. Chekanov[1], A.N. Chekanov[2]
[1]*Belgorod National Research University, Belgorod, Russia*
[2]*Putilin Belgorod Law Institute of Ministry of the Interior of Russia, Belgorod, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.255

Abstract: The paper presents two schemes for the sequential construction of the classical normal form and its quantum analogue for some classes of classical Hamiltonian systems. For quantum normal forms, a method for solving their eigenvalue problem is indicated. Based on these normal forms, a semi-classical method for solving Schrodinger equations for classical Hamiltonian systems under their quantum consideration is proposed. With this proposed method, some quantum problems were solved and it was found that this method gives a very accurate prediction for energy levels. However, this accuracy in the field of the existence of classical chaos is deteriorating. The same semiclassical method solved the quantum problem for a flat hydrogen atom in a homogeneous magnetic field. The proposed method allows carrying out all calculations using modern computer systems of analytical calculations.

Keywords: classical normal form, quantum analog of normal form, Weyl-McCoy rule, energy levels, eigenfunctions, mathematical modeling.

Беляева Ирина Николаевна – к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедры информатики, естественнонаучных дисциплин и методик преподавания ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»
Корсунов Николай Иванович – д.т.н., профессор, профессор кафедры математического и программного обеспечения информационных систем ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»
Чеканов Николай Александрович – д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры прикладной математики и компьютерного моделирования ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»
Чеканов Александр Николаевич – старший преподаватель кафедры обеспечения безопасности на объектах транспорта, ФГКОУ ВО «Белгородский юридический институт МВД России имени И.Д. Путилина»

Irina N. Belyaeva – Ph. D, Docent, Department of Computer Science, Natural Sciences and Teaching Methods, Belgorod National Research University
Nikolay I. Korsunov – Dr. Sc., Professor, Department of Mathematical and Software Information Systems, Belgorod National Research University
Nikolay A. Chekanov – Dr. Sc., Professor, Department of Applied Mathematics and Computer Modeling, Belgorod National Research University
Aleksandr N. Chekanov – Senior Lecturer, Department of Security at Transport Facilities Putilin Belgorod Law Institute of Ministry of the Interior of Russia

Поступила в редакцию/received: 06.09.2023; после рецензирования/revised: 29.09.2023; принята/accepted: 07.10.2023.