

Das Henon-Heiles-System, klassisch und quantenmechanisch

Jens-Peer Kuska und Carsten Herrmann

Best of

Das Henon-Heiles-System wird mit Mathematica klassisch und quantenmechanisch untersucht.

Das Henon-Heiles-System [1] ist ein häufig verwendetes energieerhaltendes Modellsystem. Es beschreibt ein Teilchen, das sich in einem Potential (Abb. 1) bewegt. Man erhält es beispielsweise für eine zyklische Toda-Kette aus drei Atomen [2]. Dieses Beispiel erweist sich als interessant, weil es sowohl numerische als auch analytische Techniken erfordert und weil *Mathematica* hier sein umfangreiches Leistungsspektrum entfalten kann.

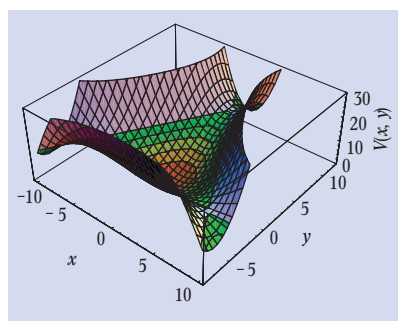


Abb. 1: Das Potential des Henon-Heiles-Systems. Ein Teilchen mit einem Anfangspunkt im weißen Bereich des Potentials kann nach Unendlich entkommen.

Das klassische Henon-Heiles-System

Die Hamilton-Funktion des Henon-Heiles-Systems ist durch

$$H(p_x, p_y, x, y) = \frac{p_x^2(t)}{2} + \frac{p_y^2(t)}{2} + \frac{1}{2}(x^2(t) + y^2(t)) + \lambda \left(x^2(t)y(t) - \frac{y^3(t)}{3} \right) \quad (1)$$

gegeben [1, 3]. Das klassische Teilchen bewegt sich in einem Potential, welches ein Polynom in x und y ist. Ein Teilchen mit einer Energie größer als $H \geq 1/(6\lambda^2)$ kann über einen der Sattelpunkte entweichen. Nur für Energien kleiner $E_{\text{esc}} = 1/(6\lambda^2)$ gibt es eine gebundene

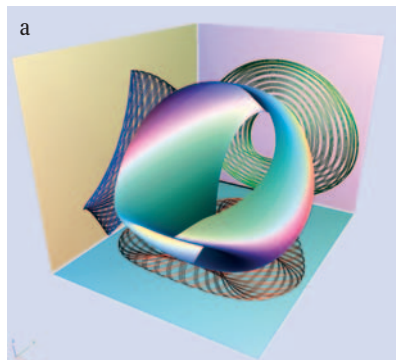


Abb. 2: ▶ a) Die Projektion der vierdimensionalen Bahnkurve für die Komponenten (x, y, p_x) über $8 \cdot 10^4$ Zeiteinheiten. Die Projektionen der Kurve auf die (x, y) -, (x, p_x) - und (y, p_x) -Ebene zeigen die Bahnkurve für die ersten 500 Zeiteinheiten.

Bewegung innerhalb des Dreiecks $p_1 = \{x_1, y_1\} = [0, 1/\lambda]$, $p_{2,3} = \{\pm\sqrt{3}/2\lambda, -1/2\lambda\}$. Für die Beispiele ist $\lambda = 1/(4\sqrt{5})$ verwendet worden.

Die Zeitentwicklung des Systems erfolgt nach den Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} x'(t) &= p_x(t) \\ y'(t) &= p_y(t) \\ p_x'(t) &= -2\lambda y(t)x(t) - x(t) \\ p_y'(t) &= -y(t) - \lambda(x^2(t) - y^2(t)). \end{aligned} \quad (2)$$

Da die Energie des Systems konstant bleibt, $H = E = \text{const}$, muss auch die numerische Lösung der Gleichungen versuchen, die Energie zu erhalten. *Mathematica* ND-SOLVE[] ist seit Version 5.0 optimal für solche Aufgaben gerüstet. Die implementierten symplektischen

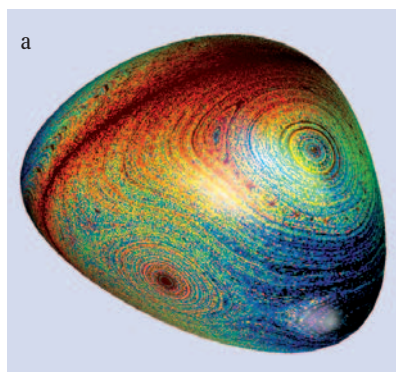
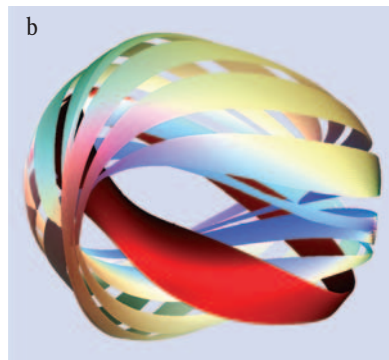


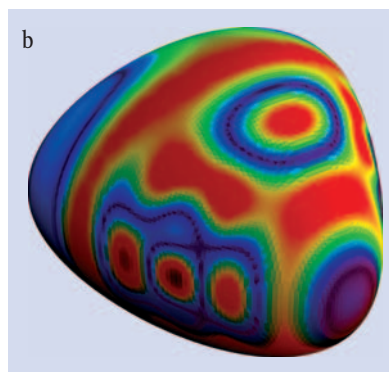
Abb. 3: ▶ a) Dichte der Poincaré-Schnitte auf der Fläche $H(p_x, 0, x, y) = 7,83274$ mit 1024 Startpunkten, insgesamt sind etwas mehr als $2 \cdot 10^6$ Punkte für die Berechnung der



▶ b) Zwei Bahnkurven der y, p_x, p_y -Koordinaten, in rot eine Kurve, die sich um einen einfachen Torus windet, in weiß eine Kurve, die sich um einen Torusknoten windet.

Runge-Kutta-Verfahren verhindern, dass bei der Integration über lange Zeitintervalle die Energie abnimmt oder gar ansteigt. Das Gleichungssystem erfüllt auch die Voraussetzungen für das Verfahren, da die Kräfte nicht explizit von den Impulsen abhängen.

Die Darstellung einer typischen Bahnkurve ist in Abb. 2a zu sehen. Damit man die Struktur der Fläche erkennt, auf der die Bahnkurve verläuft, ist die Linie aus $48 \cdot 10^4$ Punkten beleuchtet [4]. Gut erkennbar ist, dass die Fläche in dieser Projektion ein sich zweimal selbst durchdringender Torus ist. Für große und kleine Impulse p_x durchdringt sich die Fläche, nur im Vierdimensionalen ist die Kurve tatsächlich ein Torus. Neben diesen einfachen Tori



Dichte verwendet worden. ▶ b) Die Wigner-Verteilung des quantenmechanischen System auf derselben Fläche $H(p_x, 0, x, y) = 7,83274$.

Dr. Jens-Peer Kuska,
Dipl.-Math. Carsten Herrmann, M.Sc.,
mathemas ordinate,
Königsbergerstr. 97,
24161 Altenholz

gibt es auch komplexere, die sich um einen Torusknoten winden, siehe Abb. 2b.

Ohne die Beleuchtung der Linien lässt sich die Struktur der Fläche nur schwer erkennen. Deshalb ist es üblich, Poincaré-Schnitte zu zeichnen, also nur jene Punkte der

um verschiedene Startwerte mit derselben Energie zu erzeugen. Berücksichtigt man, dass sich die Energie bei einer Drehung um $2\pi/3$ und $4\pi/3$ in der xy -Ebene nicht ändert, kann man aus den einmal von FINDINSTANCE[] gefundenen Startwerten zwei weitere erzeugen. Mit diesen gefundenen Startwerten integriert man dann die Bewegungsgleichungen (2) und speichert alle Punkte, an denen die Kurve die Ebene $p_y=0$ schneidet. Für die hier verwendeten 1024 Startpunkte sind die Bewegungsgleichungen jeweils über 2048 Zeiteinheiten integriert worden. Aus den derart gefundenen Punkten lässt sich ein Histogramm auf der Fläche $H(p_x, 0, x, y)$ bilden und beides gemeinsam darstellen. So erhält man ein Bild der Dichte im Phasenraum auf der Fläche konstanter Energie (Abb. 3).

Das quantenmechanische Henon-Heiles-System

Für die quantenmechanische Beschreibung des System [5] muss die zweidimensionale statische Schrödinger-Gleichung

$$H\psi(x, y) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, y) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}(x, y) \right) + \left[\frac{1}{2}(x^2 + y^2) + \lambda \left(x^2 y - \frac{y^3}{3} \right) \right] \psi(x, y) = \varepsilon \psi(x, y) \quad (3)$$

gelöst werden. Die Mathematica-Implementierung wird in [4] ausführlich beschrieben. Der erste Teil des Potentials $V_0(x, y) = (x^2 + y^2)/2$ ist das Potential eines zweidimensionalen harmonischen Oszillators. Um das Problem zu lösen, wird man also als Basis die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators verwenden und den Hamilton-Operator mit dieser Basis in seine Matrix-Darstellung transformieren. Mit der Basis

$$\psi_{n,m} = \frac{1}{\sqrt{\pi 2^n n! 2^m m!}} \times \exp\left(-\frac{(x^2 + y^2)}{2}\right) H_n(x) H_m(y) \quad (4)$$

mit den Hermite-Polynomen $H_n(x)$ lassen sich die Matrixelemente von H

$$H_{k,l,m,n} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{k,l}(x, y) H \psi_{n,m}(x, y) dx dy \quad (5)$$

besonders effizient berechnen, ohne Mathematicas INTEGRATE[] einsetzen zu müssen. Das Potential $V(x, y) - V_0(x, y)$ wird dazu ebenfalls in eine Reihe von Hermite-Polynomen entwickelt, anschließend werden die bekannten Formeln für die Integrale über dreifache Produkte von Hermite-Polynomen verwendet. Hier zeigt sich einmal mehr die Stärke von Mathematica, symbolische und numerische Techniken miteinander verbinden zu können. Die Berechnung der Matrixdarstellung auf rein numerischem Wege würde nicht nur sehr viel länger dauern, sondern wäre auch viel empfindlicher für Rechenfehler. Das Eigenwertproblem der Matrix-Darstellung wird jedoch numerisch gelöst. Für die Darstellung wurden 265 Basisfunktionen verwendet. Man findet 99 Eigenwerte, die unterhalb der Energie E_{esc} liegen und zu gebundenen Zuständen gehören. Abb. 4 zeigt die Wahrscheinlichkeitsdichten der 88 Eigenfunktionen.

Die Wigner-Verteilung

Die quantenmechanische Wellenfunktion hängt nur von den Orten ab, die klassischen Trajektorien umfassen natürlich Orte und Impulse. Will man das quantenmechanische Ergebnis mit den klassischen Rechnungen für die Verteilung der Poincaré-Schnitte auf der Fläche

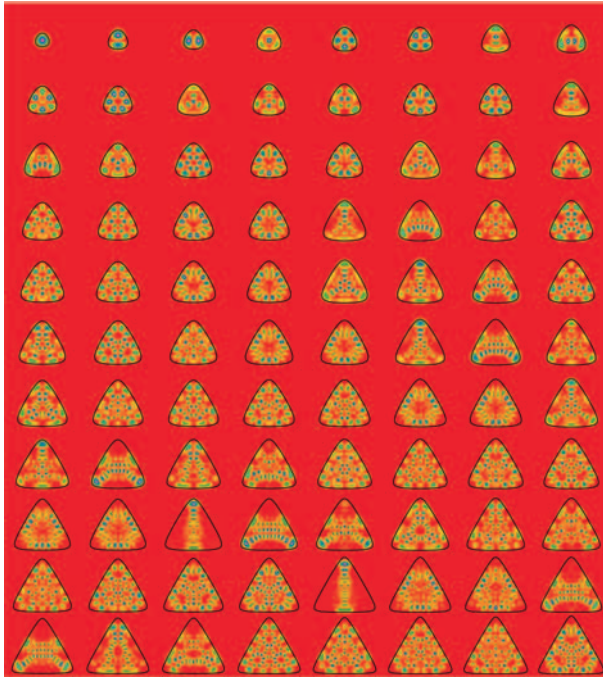


Abb. 4: Die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die ersten 88 Eigenfunktionen des quantenmechanischen Henon-Heiles-Systems, die schwarzen Kurven begrenzen jeweils den klassisch erlaubten Bereich

Kurve, die auch auf einer vierdimensionalen Fläche liegen. Für die Berechnung der Poincaré-Schnitte werden die Punkte der Kurve gewählt, die auf der Fläche $p_y=0$ liegen. Aufgrund der Energieerhaltung und der Einschränkung auf Punkte im Phasenraum mit $p_y=0$ hängt die Hamilton-Funktion nur noch von x, y und p_x ab, und man kann zuerst die Fläche zeichnen, auf der die Poincaré-Schnitte aller Bahnkurven liegen müssen. FINDINSTANCE[] leistet gute Dienste,

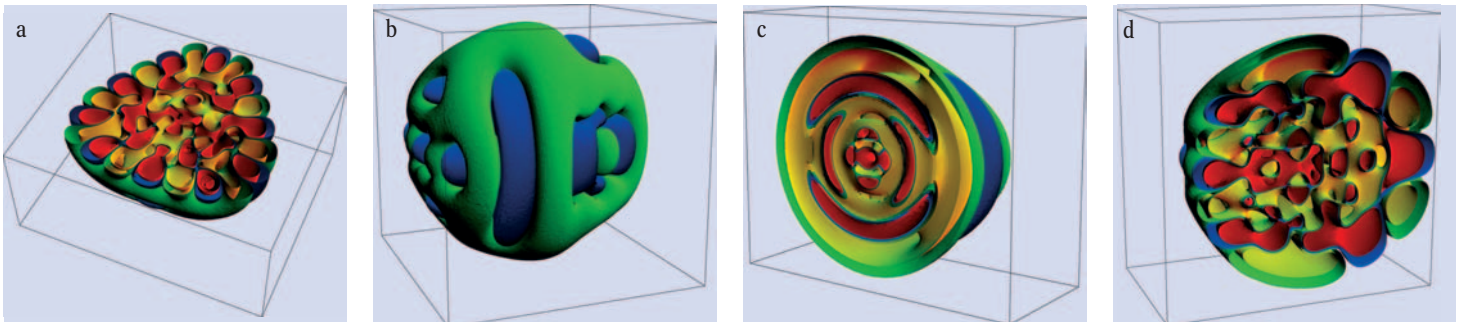


Abb. 5: Die Isoflächen der Wigner-Verteilung der 34. Wellenfunktion in der xy -Ebene (a), der xz -Ebene (b) und der yz -Ebene (c) sowie ungeschnitten (d)

für $P(x, y, p_x, 0) = -2 \cdot 10^{-3}$ (rot) $P(x, y, p_x, 0) = -35 \cdot 10^{-5}$ (blau) $P(x, y, p_x, 0) = 35 \cdot 10^{-5}$ (grün) und $P(x, y, p_x, 0) = 2 \cdot 10^{-3}$ (gelb).

konstanter Energie vergleichen, benötigt man eine quantenmechanische Verteilung, die sowohl von den Orten als auch von den Impulsen abhängt. Die Wigner-Verteilung [6] für eine Wellenfunktion $\psi(x, y)$ wird definiert durch

$$P(x, y, p_x, p_y) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi d\zeta \times \psi^*(x + \xi/2, y + \zeta/2) \psi(x - \xi/2, y - \zeta/2) \exp\left(i \frac{p_x \xi + p_y \zeta}{\hbar}\right). \quad (6)$$

Diese Funktion kann leider nicht mehr als Wahrscheinlichkeit für einen bestimmten Satz von Koordinaten (x, y, p_x, p_y) interpretiert werden, da sie auch negative Werte annehmen kann; dies hat seine Ursache in der Heisenbergschen Unschärferelation. Erst wenn man über Bereiche des Phasenraumes mittelt, die größer sind als die Unschärfe, erhält man wieder einen positiven Ausdruck. Für das vorliegende Problem lassen sich zumindest die Integrale

$$Q_{k,l,m,n}(x, y, p_x, p_y) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi d\zeta \times \psi_{k,l}^*(x + \xi/2, y + \zeta/2) \psi_{n,m}(x - \xi/2, y - \zeta/2) \exp\left(i \frac{p_x \xi + p_y \zeta}{\hbar}\right) \quad (7)$$

analytisch bestimmen, sodass die Integration zur Berechnung der Wigner-Verteilung einer Eigenfunktion nicht explizit von *Mathematica* ausgeführt werden muss. Dennoch sind zum Berechnen der Wigner-Funktion an einem Punkt des Phasenraumes noch 265^2 Summanden zu addieren. Für eine genauere Untersuchung der so berechneten Funktionen leistet FUNCTIONINTERPOLATION[] gute Dienste.

Analog zu den Poincaré-Schnitten im klassischen Fall setzt man $p_y = 0$ und erhält so die Wigner-Verteilung von x , y und p_x , deren Isoflächen $P(x, y, p_x, 0) = \text{const}$ man darstellen kann. Da *Mathematica* noch keine semi-transparenten Flächen zeichnen kann, muss man für die Darstellung mehrere Schnittebenen durch die Funktion legen (Abb. 5).

Die Korrespondenz zwischen dem klassischen System und der Wigner-Verteilung wird besonders deutlich, wenn man die Wignerfunktion auf der Fläche konstanter Energie darstellt (Abb. 3b). Die klassische Darstellung (Abb. 3a) und die quantenmechanische Verteilungsfunktion (Abb. 3b) zeigen

eine überraschende Ähnlichkeit zwischen den aus den Poincaré-Schnitten der klassischen Trajektorien gewonnenen Dichte auf der Fläche $H(x, y, p_y, 0)$ und der quantenmechanischen Wigner-Verteilung auf dieser Fläche.

Schlussbemerkungen

Mathematica hat sich bei dieser umfassenden Untersuchung des Hénon-Heiles-Systems hervorragend bewährt. Die meisten Berechnungen haben nur wenige Sekunden oder Minuten benötigt. Nur die Berechnung der Isoflächen der Wigner-Funktion hat einige Stunden gedauert. Die besondere Stärke von *Mathematica* ist dabei die Verbindung von symbolischen und numerischen Algorithmen, die völlig neue Berechnungen erlaubt.

Literatur

- [1] M. Hénon und C. Heiles, *Astronom. Journal* **69**, 73 (1964)
- [2] J. Ford, S. D. Stoddard und J. S. Turner, *Prog. Theoret. Phys.* **50**, 1547 (1973)
- [3] J.-P. Kuska, *Mathematica und C in der modernen Theoretischen Physik*, Springer-Verlag (1997)
- [4] J.-P. Kuska, in *New Ideas in Symbolic Computation: Proceedings of the 6th Mathematica Symposium* (8 2004), J. C. Peter Mitic, C. Jacob, (Hrsg.), Positive Corporation Ltd. Hampshire, UK
- [5] M. J. Davis und E. J. Heller, *J. of Chem. Phys.* **71**, 3383 (1979)
- [6] E. Wigner, *Phys. Rev.* **40**, 749 (1932)