

## 6. Conclusion

Thus, a linear relation between  $C_{Cu}$  ( $^{63}Cu$  NMR data) and  $C_{Zn}$  and  $C_{Ni}$  ( $^{67}Cu(^{67}Zn)$  and  $^{61}Cu(^{61}Ni)$  EMS data) holds for the majority of metal oxides of divalent copper, indicating the similarity of the electronic structure of copper ( $Cu^{2+}$ ,  $3d^9$ ) in these lattices. The data for copper in  $Cu_2O$  and for copper at Cu(I) sites of the  $YBa_2Cu_3O_6$  are naturally excluded from this relation [owing to the monovalence of the copper ( $Cu^+$ ,  $3d^{10}$ ) in these lattices], as are the data for Cu(I) in  $YBa_2Cu_3O_7$  (since the principal axes of the total and crystal EFG have different orientations). An analogous linear relation obtains between  $C_{Cu}$  ( $^{63}Cu$  NMR data) and  $V_{zz}$  (calculated in the approximation of the point-charge model) for a much larger number of metal oxides of copper except the already mentioned ones. The latter relation can be used to assess the validity of proposed model charge distributions among the lattice sites for superconducting ceramics.

## References

1. Asayama K., Kitaoka Y., Zheng G.-Q., Ishida K., Magishi K. NMR study of high-TC superconductors // Physica B: Condensed Matter. 1996. V. 223–224. № 1–4. P. 478–483.
2. Bordovsky G., Marchenko A., and Seregin P. Mössbauer of Negative Centers in Semiconductors and Superconductors. Identification, Properties, and Application. Academic Publishing GmbH & Co. 2012. 499 p.
3. Seregin P. P., Masterov V. F., Nasredinov F. S., Seregin N. P. Correlations of the  $^{63}Cu$  NQR/NMR data with the  $^{67}Cu(^{67}Zn)$  emission Mössbauer data for htsc lattices as a tool for the determination of atomic charges // Physica Status Solidi (B): Basic Solid State Physics. 1997. V. 201. No. 1. P. 269–275.

*A. В. Ляпцев*

## СИММЕТРИЯ В ЗАДАЧАХ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИНАМИКИ. ПРОЯВЛЕНИЕ СВОЙСТВ СИММЕТРИИ В ПОЛЯРИЗАЦИИ ИЗЛУЧЕНИЯ

*Исследовано проявление свойств симметрии хаотического движения в случае, когда система описывается уравнениями классической динамики, а точечная группа симметрии системы содержит некомутирующие элементы и, как следствие, имеет двумерные неприводимые представления. Численными расчетами показано, что излучение такой системы полностью деполаризовано, в то время как при понижении симметрии системы излучение становится частично поляризованным. Такие поляризационные характеристики полностью соответствуют характеристикам, получаемым при квантово-механическом описании аналогичной системы.*

**Ключевые слова:** нелинейная динамика, динамический хаос, симметрия, поляризация излучения.

*A. Liaptcev*

## Symmetry in Problems of Nonlinear Dynamics. The Manifestation of The Properties of The Symmetry in The Polarization of Radiation

*Manifestation of symmetry properties of chaotic motions is investigated in a case when the system is described by equations of classical dynamics. The considered group of symmetry contains non-commuting elements and as consequence has two-dimensional irreducible representations. Numerical calculation shows, that radiation of this system are fully depolarized, at the same time at a lower symmetry of the system, radiation becomes partially polarized. Such*

*polarization characteristics fully correspond to the same characteristics obtained with the help of quantum-mechanical description of similar system.*

**Keywords:** nonlinear dynamics, dynamic chaos, symmetry, polarization of radiation.

Принципы симметрии являются универсальными при исследовании любых физических систем независимо от способов, применяемых для описания этих систем. Тем не менее наибольшую роль симметрия играет при квантово-механическом описании систем, когда она служит для классификации стационарных состояний и свойств, связанных с симметрией этих состояний. В задачах классической динамики симметрия, как правило, используется в связи с появлением интегралов движения, связанных с непрерывными группами симметрии функции Лагранжа (см., например, работы [1; 10]). Исключение составляют задачи по исследованию гармонических колебаний в многомерных системах, когда нормальные колебания классифицируются так же, как и при квантово-механическом описании. Явное проявление свойств симметрии в задачах классической динамики наблюдается лишь при исследовании регулярных (периодических и квазипериодических) движений. Примером может служить кеплеровская задача, в которой движение по замкнутым траекториям характеризуется такими интегралами движения, как энергия, момент импульса и вектор, обусловленный дополнительной симметрией кеплеровской задачи [10].

Следует заметить, что регулярные движения в задачах классической динамики являются лишь приближением, которое может хорошо описывать поведение реальной системы на некотором временном интервале. В последние годы наметился интерес к изучению движений противоположного типа по отношению к регулярным движениям — хаотических движений. Такие движения реализуются, в частности в открытых системах при наличии диссипации, когда фазовая траектория системы стремится к предельному множеству со стохастическими свойствами — к странному аттрактору [4; 6]. Поскольку траектории частиц становятся в этом случае необычайно сложными и запутанными, бессмысленно следить за каждой траекторией в отдельности. Вместо этого следует рассматривать сразу совокупность траекторий, которые в любой момент времени занимают конечный объем фазового пространства, а распределение частиц в нем характеризуется некоторой плотностью [6]. Описание системы становится, таким образом, подобным квантово-механическому описанию открытой системы при помощи матрицы плотности. При наличии симметрии системы матрица плотности преобразуется по некоторому представлению соответствующей группы симметрии и может быть разложена по неприводимым представлениям этой группы, например по неприводимым представлениям группы вращений [2]. Можно ожидать, что аналогичными свойствами симметрии будет обладать плотность траекторий в фазовом пространстве при хаотическом движении системы, описываемой классической динамикой.

В работах [11; 12] мы исследовали свойства симметрии простейших систем, в которых реализуется хаотическое движение, при помощи численного эксперимента. А именно, были рассмотрены такие системы, как нелинейный осциллятор и одномерный ротатор, находящиеся под воздействием внешнего гармонического возмущения. Эти системы являются примером простейших систем, в которых реализуется хаотический режим, поскольку они описываются системой трех автономных дифференциальных уравнений 1-го порядка. Фазовая траектория в этом случае представляет собой линию в трехмерном пространстве, то есть в пространстве с минимальной размерностью, необходимой для существования предельного множества в виде странного аттрактора. Наглядно свойства симметрии странного аттрактора проявляются при рассмотрении сечений Пуанкаре. Численный эксперимент показал, что для рассмотренных систем сечения Пуанкаре инвариантны (в статисти-

ческом смысле) относительно преобразований соответствующих групп симметрии. В то же время если параметры, характеризующие систему, становятся такими, что в системе реализуются регулярные периодические движения, симметрия фазовой траектории, которая в этом случае становится замкнутой кривой, понижается. Фактически при переходе от хаотического движения к регулярному происходит спонтанное нарушение симметрии, аналогичное нарушению симметрии при фазовых переходах в различных физических системах.

Следует отметить, что даже в таких простейших системах, о которых говорилось выше, группа симметрии может содержать некоммутирующие элементы, так что среди неприводимых представлений группы появляются многомерные представления. При квантовомеханическом описании появление многомерных неприводимых представлений приводит к возникновению состояний с вырожденными уровнями энергии [8; 13]. Эффекты вырождения могут наблюдаться при понижении симметрии вследствие некоторых возмущений и, как следствие, к расщеплению линий в спектрах излучения, поглощения или рассеяния этих систем. Эти возмущения могут быть как внешними (наложение внешнего поля), так и внутренними (учет взаимодействий, которыми пренебрегают при приближенном описании). Поскольку в системах, описываемых классической нелинейной динамикой, квантование уровней энергии отсутствует, наблюдать подобные проявления симметрии невозможно и говорить о каком-либо вырождении при наличии многомерных неприводимых представлений группы симметрии системы не имеет смысла. Однако проявление симметрии, связанной с существованием многомерных представлений, можно также наблюдать в поляризации электромагнитной волны, излучаемой системой. Поскольку поляризационные эффекты излучения не связаны прямо с дискретностью уровней энергии, можно предположить, что подобные эффекты будут наблюдаться и в системах, описываемых классической динамикой при наличии хаотических движений.

В данной работе мы рассмотрим одну из таких систем и приведем результаты численного эксперимента, иллюстрирующие наличие поляризационных эффектов, обусловленных симметрией системы, группа симметрии которой имеет многомерные неприводимые представления.

В качестве модели рассмотрим систему, способную совершать одномерное вращение в тормозящем поле, находящуюся под воздействием внешнего периодического момента сил. Физически подобную систему можно сконструировать как стержень с зарядом на конце, на который действуют система из трех неподвижных зарядов и вихревое электрическое поле, образуемое под воздействием переменного магнитного поля (рис. 1).

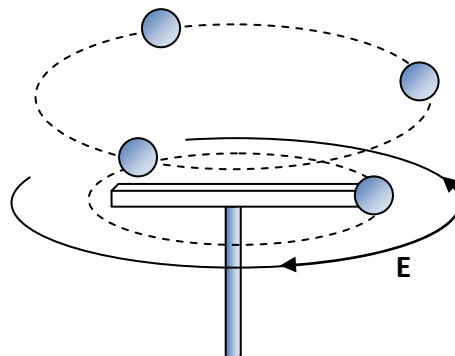


Рис. 1. Модель ротатора

Уравнение движения можно смоделировать в виде:

$$\ddot{\theta} + \gamma\dot{\theta} + \sin(3\theta) = F \sin(\omega t). \quad (1)$$

Параметры  $F$  и  $\omega$  характеризуют амплитуду и частоту внешнего момента сил, параметр  $\gamma$  играет роль коэффициента момента сил вязкого трения и является мерой диссипации.

Уравнение (1) можно свести к автономной системе трех дифференциальных уравнений 1-го порядка:

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= \Omega, \\ \dot{\Omega} &= F \sin \varphi - \gamma\Omega - \sin(3\theta), \\ \dot{\varphi} &= \omega. \end{aligned} \quad (2)$$

Эта система инвариантна относительно преобразований  $\varphi \rightarrow \varphi + 2\pi$ ,  $\omega \rightarrow \omega + 2\pi$ , то есть переменные  $\varphi$  и  $\theta$  — циклические. Помимо этого, система уравнений инвариантна относительно следующих совокупностей преобразований:

$$\theta \rightarrow -\theta, \quad \Omega \rightarrow -\Omega, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi, \quad (3)$$

$$\theta \rightarrow \theta + 2\pi/3, \quad \Omega \rightarrow \Omega, \quad \varphi \rightarrow \varphi. \quad (4)$$

Группу симметрии можно найти, если вместо угловых координат ввести «декартовы» координаты, определяемые выражениями:

$$\begin{aligned} X &= \Omega \cos \varphi \cos \theta, \\ Y &= \Omega \cos \varphi \sin \theta, \\ Z &= \Omega \sin \varphi. \end{aligned} \quad (5)$$

Угол  $\varphi$  здесь играет роль широты, а угол  $\theta$  — роль долготы. При такой замене координат преобразованиям (3), (4) соответствуют следующие преобразования:

$$X \rightarrow X, \quad Y \rightarrow -Y, \quad Z \rightarrow Z \quad (6)$$

(отражение в плоскости  $(X, Z)$ ),

$$X \rightarrow X \cos(2\pi/3) + Y \sin(2\pi/3), \quad Y \rightarrow -X \sin(2\pi/3) + Y \cos(2\pi/3), \quad Z \rightarrow Z \quad (7)$$

(поворот на угол  $2\pi/3$  вокруг оси  $Z$ ). Соответствующая группа симметрии изоморфна точечной группе  $C_{3v}$ .

Вышеописанная система излучает электромагнитную волну. Прежде чем исследовать поляризационные особенности такого излучения, обратимся к эквивалентной квантово-механической системе, чтобы понять, какие поляризационные особенности излучения можно ожидать, исходя из симметрии задачи. Аналогом классической системы является квантово-механическая система, находящаяся под воздействием внешнего периодического поля. Излучение в этом случае возникает при переходах между уровнями квазиэнергии, которые определяются из уравнения [7]:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (H(t) - E)\psi. \quad (8)$$

В этом уравнении  $H$  — гамильтониан, периодически зависящий от времени,  $E$  — уровни квазиэнергии, а  $\psi(t)$  — периодически зависящие от времени (с тем же периодом, что и гамильтониан) функции, соответствующие квазиэнергетическим состояниям (КЭС). Для рассматриваемой модели гамильтониан может быть получен при включении в него

магнитного поля в соответствии с общими правилами (см., например, литературу [8]) и может быть представлен в виде

$$H(t) = \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta} + V \cos(\omega t) \right)^2 + U(\theta). \quad (9)$$

В этом выражении параметр  $V$  соответствует параметру  $F$  уравнения (1), а потенциал  $U(\theta)$  есть функция с периодом  $2\pi/3$ . Гамильтониан, таким образом, остается инвариантным при сдвиге угла  $\theta$  на величину, кратную  $2\pi/3$ . Помимо этого, гамильтониан остается инвариантным при операции, которая является суперпозицией операции инверсии координат (в данном случае угла  $-\theta$ ) и сдвига по времени на полпериода внешнего поля:

$$\theta \rightarrow -\theta, \quad t \rightarrow t + \frac{\pi}{\omega}. \quad (10)$$

Подобная симметрия характерна для квазиэнергетических состояний и применяется для построения групп симметрии квазиэнергетических состояний [3]. Несложно понять, что преобразования симметрии полностью эквивалентны преобразованиям симметрии (3) и (4), а соответствующая группа симметрии является группой  $C_{3v}$ .

Чтобы понять связь между симметрией и поляризацией излучения, рассмотрим вначале предельный случай, когда величины  $V$  и  $U$ , входящие в гамильтониан (9), стремятся к нулю:

$$V \rightarrow 0, \quad U \rightarrow 0. \quad (11)$$

В этом предельном случае собственные функции, являющиеся решением уравнения (9), легко находятся:

$$\psi_{\pm|k|,n}^{(tr)} = C \exp(ik\theta) \exp(in\omega t). \quad (12)$$

В этом выражении  $C$  — нормировочная константа,  $k$  и  $n$  — целые числа, определяющие уровни квазиэнергии:

$$E_{|k|,n} = \frac{\hbar^2}{2} k^2 + \hbar n \omega. \quad (13)$$

Очевидно, что имеется вырождение состояний по знаку  $k$ .

Собственные функции (12) являются собственными функциями коммутирующего с гамильтонианом оператора трансляции на произвольный угол  $\theta$ , в частности, на угол, кратный  $2\pi/3$ . Из этих функций линейной комбинацией можно построить функции, являющиеся собственными функциями оператора инверсии, определяемого преобразованиями (10):

$$\begin{aligned} \psi_{+|k|,n}^{(inv)} &= C' (-1)^n \cos(k\theta) \exp(in\omega t), \\ \psi_{-|k|,n}^{(inv)} &= C' (-1)^n \sin(k\theta) \exp(in\omega t). \end{aligned} \quad (14)$$

Эти функции также соответствуют уровням энергии (13). Именно наличие нескольких операторов, коммутирующих с гамильтонианом, но не коммутирующих между собой, приводит к вырождению уровней.

Вероятность излучения и поглощения электромагнитной волны определяется матричными элементами перехода между соответствующими состояниями. При этом матричные элементы, вычисленные с функциями (12), определяют вероятность излучения и поглощения волны с циркулярной поляризацией, а матричные элементы, вычисленные с функциями (14), — вероятность излучения и поглощения волны, линейно поляризованной в плоскости, определяемой углом  $\theta = 0$ . Помимо функций (13) и (14), можно, выбирая различные коэффициенты линейной комбинации, получить функции, не являющиеся собственными функциями операторов трансляции и инверсии. Переходы между такими состояниями соответствуют излучению и поглощению волны, которая в общем случае имеет эллиптическую поляризацию. Поляризация излученной волны определяется тем, какое состояние заселено в результате некоторых процессов возбуждения системы. Если система находится в возбужденном состоянии, которое является чистым, то есть описывается волновой функцией, то излучаемая волна имеет эллиптическую поляризацию. Однако в общем случае возбужденное состояние не является чистым состоянием и описывается матрицей плотности. Излучаемая волна при этом является частично поляризованной [2]. В частности, если возбуждение системы является полносимметричным, система излучает деполаризованную волну. Это легко понять, если учесть, что при излучении эллиптически поляризованной волны одна из осей (то есть ось, соответствующая какому-либо углу  $\theta$ ) является выделенной. Если же излучается волна с циркулярной поляризацией, то выделенным является одно из направлений (по часовой стрелке или против часовой стрелки). В обоих случаях состояние системы не является полносимметричным. Таким образом, излучение поляризованной волны противоречит полносимметричному возбуждению системы.

Включение внешнего поля ( $V \neq 0$ ) и тормозящего потенциала ( $U \neq 0$ ) не изменяет симметрии по отношению к операциям инверсии и трансляции на угол, кратный  $2\pi/3$ . Двукратное вырождение уровней остается, и можно определить функции  $\psi_{\pm\alpha}^{(tr)}$  и  $\psi_{\pm\alpha}^{(inv)}$ , являющиеся собственными функциями операторов трансляции и инверсии и соответствующие одним и тем же собственным значениям квазиэнергии, нумеруемым индексом  $\alpha$ . Все вышесказанное о поляризации излучения остается справедливым и в этом случае. В частности, при полносимметричном возбуждении излучение должно быть деполаризованным.

Для более детального анализа поляризации излучения системы удобно использовать параметры Стокса [5; 2]. Далее мы будем придерживаться обозначений  $\eta_1, \eta_2, \eta_3$ , используемых в монографии [2]. Для определения параметров выделяют две оси:  $x$  и  $y$ , перпендикулярные направлению распространения волны. Эти оси тем или иным образом связаны с условиями наблюдения, например с поляризаторами, используемыми при наблюдении. Параметр  $\eta_3$  определяется выражением

$$\eta_3 = (I_x - I_y) / I, \quad (15)$$

где  $I$  — полная интенсивность волны,  $I_x$  и  $I_y$  — интенсивности волн, линейно поляризованных вдоль осей  $x$  и  $y$ . Параметр  $\eta_1$  определяется выражением

$$\eta_1 = (I_{x'} - I_{y'}) / I, \quad (16)$$

где  $I_{x'}, I_{y'}$  — интенсивности волн, линейно поляризованных вдоль осей  $x', y'$ , полученных поворотом осей  $x, y$  на  $45^\circ$ . Наконец, параметр  $\eta_2$  определяется выражением

$$\eta_2 = (I_+ - I_-) / I, \quad (17)$$

где  $I_+$  и  $I_-$  — интенсивности волн с правой и левой поляризацией. Эти три параметра определяют, насколько поляризована волна, что характеризуется параметром *степень поляризации* [5]:

$$P = \eta_1^2 + \eta_2^2 + \eta_3^2. \quad (18)$$

Заметим, что Блум [2] использует это же обозначение для корня из правой части выражения (18). Степень поляризации может принимать значения от 0 до 1. Полностью поляризованному излучению (для классического описания — это эллиптически поляризованная волна) соответствует значение 1, а полностью деполаризованному излучению — значение, равное 0.

Из предыдущего анализа следует, что для рассматриваемой нами модели при квантово-механическом описании в силу симметрии задачи должно выполняться равенство  $P = 0$ . Поскольку принципы симметрии справедливы независимо от способа описания, можно ожидать, что аналогичные результаты должны наблюдаться также и для волны, излучаемой системой, описываемой классическим способом. Таким образом, можно попробовать исследовать поляризационные характеристики волны, излучаемой системой, описываемой уравнением (1). Для этого можно использовать выражение для амплитуды волны, излучаемой при движении заряда с ускорением:

$$E = C \ddot{d}, \quad (19)$$

где  $d$  — вектор дипольного момента системы, а  $C$  — константа, несущественная для определения поляризационных характеристик системы. Следует заметить, что понятие циркулярной поляризации определено только для монохроматической волны [9]. При хаотическом движении спектр излучения далек от монохроматического [6]. Поэтому целесообразно выделить из излученной волны, вычисленной при помощи формулы (19), монохроматическую составляющую, для которой можно и проводить затем анализ поляризаций. Поскольку, в отличие от квантово-механической системы, спектр излучения не содержит каких-либо дискретных линий, целесообразно выделять излучение на частоте, кратной частоте вынуждающего воздействия, в простейшем случае — на частоте этого воздействия. Такое излучение соответствует релеевскому рассеянию света.

Выделение монохроматической составляющей естественно провести при помощи преобразования Фурье. Однако если преобразование Фурье проводить для всего рассматриваемого интервала времени, мы получим когерентную (в пределе монохроматическую) волну, для которой степень поляризации будет близка к единице. Чтобы провести исследование, аналогичное тому, что проводится при квантово-механическом описании, достаточно понять, что для дискретного спектра излучение всегда является квазимонохроматическим с некоторой шириной линии  $\Gamma$ . Величина, обратная ширине линии, есть характерное время когерентности  $\tau \sim \Gamma^{-1}$ . Ширина  $\Gamma$  определяется диссипацией, и в рассматриваемой модели в качестве ее следует взять параметр  $\gamma$ . Таким образом, возможный метод расчета поляризационных характеристик исследуемой модели заключается в том, чтобы вычислять интенсивности  $I_x, I_y, I_{x'}, I_{y'}, I_+, I_-$  на последовательных временных интервалах порядка  $\tau \sim \gamma^{-1}$ , используя преобразование Фурье, затем проводить усреднение этих интенсивностей по нескольким таким интервалам, после чего вычислять параметры Стокса и степень поляризации  $P$ .

Достаточно очевидно, что при таких вычислениях мы можем получить малый, но отличный от нуля параметр  $P$ . Даже если степень поляризации окажется много меньше единицы, например 0,01, остается открытым вопрос — является ли это проявлением симметрии или определяется какими-либо другими факторами, например погрешностью вычислений или малым числом интервалов, на которых проводится усреднение. Выявить роль симметрии можно, добавляя в выражение для тормозящего барьера слагаемые, понижающие группу симметрии. Для этого вместо уравнения (1) будем рассматривать уравнение

$$\ddot{\theta} + \gamma\dot{\theta} + \sin(3\theta) + \beta \cos(6\theta) + \delta \sin(2\theta) = F \sin(\omega t). \quad (20)$$

При  $\beta = \delta = 0$  мы получаем рассмотренную выше систему с симметрией  $C_{3v}$ . При  $\beta \neq 0$ ,  $\delta = 0$  симметрия понижается, уравнение (20) становится неинвариантным относительно операции инверсии (3). Соответствующая группа симметрии  $C_3$  не имеет двумерных представлений. Напротив, при  $\beta = 0$ ,  $\delta \neq 0$  уравнение (20) становится неинвариантным относительно операции сдвига переменной  $\theta$  на угол  $2\pi/3$  (4). Соответствующая группа симметрии  $C_3$  также не имеет двумерных неприводимых представлений.

В случае, когда уравнение (20) становится неинвариантным по отношению к операции инверсии ( $\beta \neq 0$ ), нарушается симметрия, в соответствии с которой интенсивности излучения с правой и левой поляризацией оказываются равны. Таким образом, в этом случае следует ожидать существенно отличного от нуля значения параметра  $\eta_2$ . При  $\delta \neq 0$  образуются выделенные оси, соответствующие углам  $\theta=0$  и  $\theta=\pi/2$ , и следует ожидать, что параметр  $\eta_3$  окажется отличным от нуля. Заметим, однако, что симметрия системы не изменится, если в уравнении (20) угол  $\theta$  сдвинуть на некоторую величину, в то время как параметры Стокса изменятся. Таким образом, параметры Стокса характеризуют не только свойства рассматриваемой системы, но и способ наблюдения ее излучения (выбор осей для рассмотрения поляризации). Используя определение параметров Стокса, несложно показать, что для когерентной волны (в общем случае — эллиптически поляризованная волна) параметр, характеризующий круговую поляризацию  $\eta_2$ , остается инвариантным относительно поворота осей, в то время как параметры  $\eta_1$  и  $\eta_3$  преобразуются, так что новые параметры являются линейной комбинацией старых параметров:

$$\begin{pmatrix} \eta'_1 \\ \eta'_2 \end{pmatrix} = R(2\varphi) \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix},$$

где  $R(\varphi)$  — матрица, описывающая поворот осей координат на угол  $\varphi$ . Инвариантным при этом остается параметр

$$h_l = \sqrt{\eta_1^2 + \eta_3^2}, \quad (21)$$

который характеризует только свойства самой системы независимо от способа наблюдения. Далее для краткости мы будем называть этот параметр *степенью линейной поляризации*. *Степень циркулярной поляризации* определим как модуль параметра  $\eta_2$ :

$$h_c = |\eta_2|. \quad (22)$$

Таким образом, из аналога между классическим и квантовым рассмотрением одной и той же симметрии можно предположить, что при параметрах  $\beta = \delta = 0$  степень линейной



поляризации  $h_l$ , степень циркулярной поляризации  $h_c$  и степень поляризации  $P$  в случае хаотического движения должны быть близки к нулю. При  $\beta \neq 0, \delta = 0$  степень циркулярной поляризации  $h_c$  (и соответственно степень поляризации  $P$ ) должны быть существенно отличными от нуля. При  $\beta=0, \delta \neq 0$  степень линейной поляризации  $h_l$  (и соответственно степень поляризации  $P$ ) должны быть существенно отличными от нуля. Наконец, при  $\beta \neq 0, \delta \neq 0$  все три степени поляризации должны быть существенно отличными от нуля.

Результаты расчетов степеней поляризации при различных значениях параметров  $\beta$  и  $\delta$  приведены в таблице.

		$\begin{pmatrix} h_l \\ h_c \\ P \end{pmatrix}$					
$\begin{pmatrix} \delta \\ \beta \end{pmatrix}$		0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5
0	0,02	0,02	0,03	0,02	0,01	0,015	0,01
	0,02	0,02	0,03	0,19	0,40	0,41	0,37
	0,001	0,002	0,039	0,158	0,164	0,136	
0,1	0,06	0,06	0,08	0,16	0,10	0,15	0,16
	0,014	0,014	0,04	0,10	0,27	0,29	0,36
	0,004	0,008	0,035	0,082	0,110	0,153	
0,2	0,29	0,25	0,22	0,23	Регулярное движение	Регулярное движение	
	0,02	0,05	0,15	0,12			
	0,088	0,065	0,070	0,068			
0,3	0,32	0,33	0,30	0,29	0,19	0,13	
	0,02	0,00	0,06	0,01	0,17	0,22	
	0,103	0,107	0,096	0,085	0,064	0,063	
0,4	0,44	0,40	Регулярное движение	0,39	0,24	0,24	
	0,01	0,015		0,04	0,16	0,18	
	0,190	0,145		0,157	0,087	0,092	
0,5	0,53	0,53	0,50	0,44	0,50	0,42	
	0,01	0,11	0,12	0,23	0,13	0,12	
	0,280	0,296	0,270	0,245	0,262	0,198	

Во всех случаях использовались параметры  $F = 1,2, \omega = 1,2, \gamma = 0,1$ , а число интервалов, по которым проводилось усреднение, равнялось 2000. Заметим, что для рассматриваемых нелинейных систем характерны переходы от хаотического движения к регулярному и обратно при изменении некоторых параметров системы. Подобные переходы наблюдаются и в данном случае при некоторых значениях параметров. Соответствующие результаты отражены в таблице.

Как видно из расчетов, уже при значениях параметров  $\beta$  и  $\delta$ , равных 0,2, соответствующие степени поляризации на порядок превышают значения степеней поляризации, вычисленных при нулевых значениях параметров  $\beta$  и  $\delta$ . Заметим, что визуально графики, описывающие тормозящие потенциалы при этих значениях параметров, изменяются незначительно. На рис. 2 показаны функции  $f(\theta) = \sin(3\theta) + \beta \cos(6\theta) + \delta \sin(2\theta)$ , вычисленные при различных значениях параметров.

Из таблицы также видно, что при  $\beta \neq 0$  и  $\delta \neq 0$  становятся существенными как степень линейной поляризации, так и степень циркулярной поляризации, однако какой-либо монотонной зависимости степеней поляризации при этом не наблюдается. Наглядно зависимость  $P(\beta, \delta)$  проиллюстрирована на гистограмме (рис. 3).

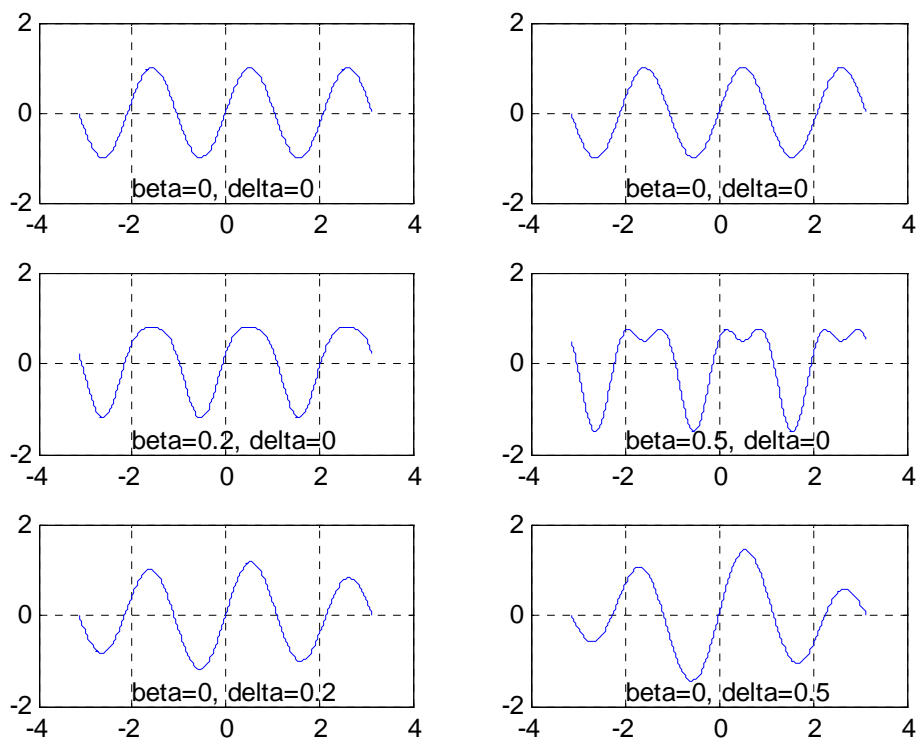
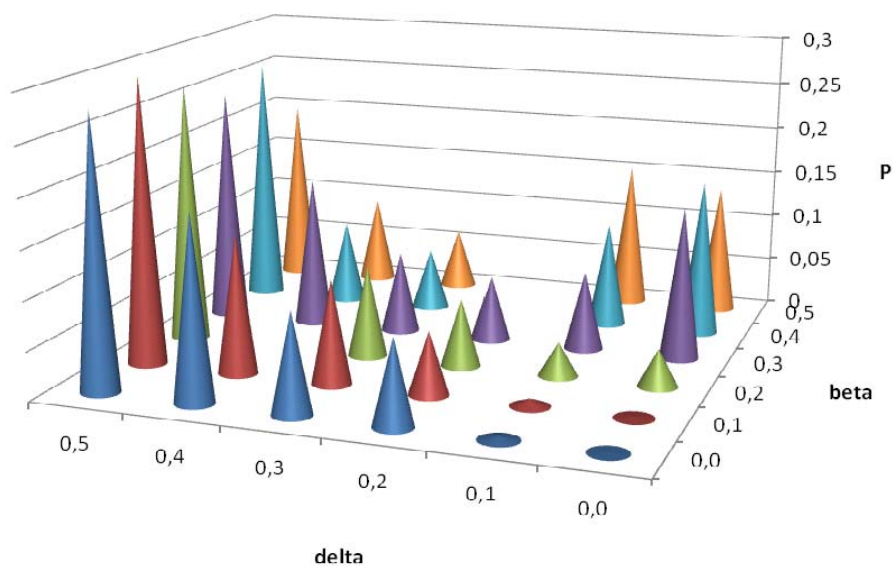


Рис. 2

Рис. 3. Зависимость поляризации от параметров  $\beta$  и  $\delta$

При регулярных движениях, которые устанавливаются за время порядка  $\tau \sim \gamma^{-1}$ , излучаемая волна является когерентной, так что степень поляризации  $P$  становится (с точностью до погрешности вычисления) равной единице. Регулярные движения для рассматриваемой системы, как отмечалось в литературе [12], имеют характер колебаний или вращений с наложением колебаний. В первом случае, как показывают вычисления, степень циркулярной поляризации равна 0, а степень линейной поляризации равна 1. Соответствующее колебание изображено на рис. 4.

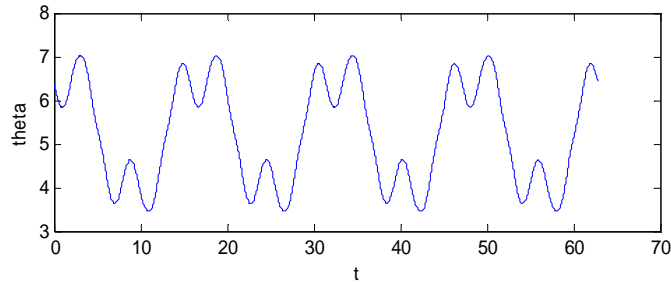


Рис. 4. График регулярного движения колебательного типа.  
 Параметры расчета:  $F = 0,5$ ,  $\omega = 1,2$ ,  $\gamma = 0,1$ . Результат:  $P = 1$ ,  $h_l = 1$ ,  $h_c = 0$

В случае вращения с наложенными колебаниями оба параметра  $h_l$  и  $h_c$  оказываются отличными от нуля. График такого движения приведен на рис. 5.

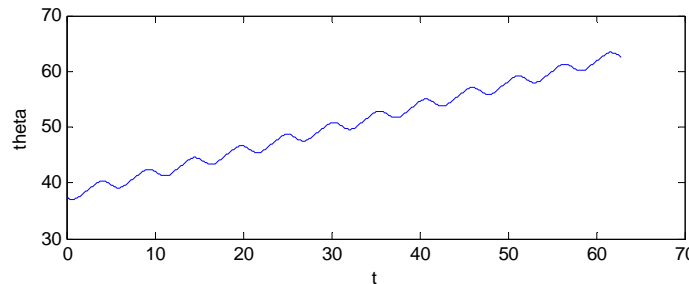


Рис. 5. График регулярного движения колебательного типа.  
 Параметры расчета:  $F = 0,8$ ,  $\omega = 1,2$ ,  $\gamma = 0,1$ .  
 Результат:  $P = 1$ ,  $h_l = 0,35523$ ,  $h_c = 0,93457$

Заметим, что в случае регулярных движений параметры Стокса вычисляются с большей точностью, в то время как для хаотического движения результат вычисления изменяется при проведении нового вычисления, что приводит к тому, что точность, полученная при численном эксперименте, не превышает двух значащих цифр.

Проведенный численный эксперимент позволяет утверждать, что при наличии в точечной группе симметрии некоммутирующих элементов, что эквивалентно появлению двумерных неприводимых представлений группы, излучение системы при хаотическом движении становится деполаризованным. При понижении симметрии системы излучение системы становится частично поляризованным, при этом, если сохраняется симметрия по отношению к сдвигу или инверсии, остается равной нулю степень циркулярной, или соответственно, линейной поляризации. Если же при некоторых значениях параметров системы

движение становится регулярным, что эквивалентно спонтанному понижению симметрии, излучение становится полностью поляризованным.

На наш взгляд, представляет интерес рассмотрение системы, симметрия которой такова, что среди неприводимых представлений соответствующей точечной группы существуют трехмерные представления. Однако такая система должна иметь, по крайней мере, две степени свободы, а следовательно, для ее описания на классическом языке необходимо рассматривать по меньшей мере четырехмерное фазовое пространство.

### Список литературы

1. Арнольд В. И. Математические методы классической механики. М.: Наука, 1979.
2. Блум К. Теория матрицы плотности и ее приложения. М.: Мир, 1983.
3. Бордо В. Г., Киселев А. А. О классификации квазиэнергетических состояний молекулы // Оптика и спектроскопия. Т. 49. 1980. С. 1027–1029.
4. Гритченко В. Т., Мацтпура В. Т., Снарский А. А. Введение в нелинейную динамику. М., 2007.
5. Джеррард А., Берч Дж. М. Введение в матричную оптику. М.: Мир, 1978.
6. Заславский Г. М., Сагдеев Р. З. Введение в нелинейную физику: от маятника до турбулентности и хаоса. М., 1988.
7. Зельдович Я. Б. Рассеяние и излучение квантовой системой в сильном электромагнитном поле // Успехи физ. наук. 1973. Т. 110. С. 139–151.
8. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 3: Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Физматлит, 2001.
9. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 3: Теория поля. М.: Физматлит, 2001.
10. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 1: Механика. М.: Физматлит, 2001.
11. Ляпцев А. В. Симметрия регулярных и хаотических движений в задачах нелинейной динамики. Уравнение Дуффинга // Известия РГПУ им. А. И. Герцена: Научный журнал: Естественные и точные науки. 2013. № 157. С. 24–34.
12. Ляпцев А. В. Симметрия регулярных и хаотических движений в задачах нелинейной динамики. Ротатор в периодическом поле // Известия РГПУ им. А. И. Герцена: Научный журнал: Естественные и точные науки. 2014. № 165.
13. Петрашень М. И., Трифонов Е. Д. Применение теории групп в квантовой механике. М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2010. 280 с.

### REFERENCES

1. Arnol'd V. I. Matematicheskie metody klassicheskoy mehaniki. M.: Nauka, 1979.
2. Blum K. Teorija matritsy plotnosti i ee prilozhenija. M.: Mir, 1983.
3. Bordo V. G., Kiselev A. A. O klassifikatsii kvazijenergeticheskikh sostojanij molekuly // Opt. i spektr. 1980. T. 49. S. 1027–1029.
4. Gritchenko V. T., Matstpura V. T., Snarskij A. A. Vvedenie v nelinejnuju dinamiku. M., 2007.
5. Dzherrard A., Berch Dzh. M. Vvedenie v matrichnuju optiku. M.: Mir, 1978.
6. Zaslavskij G. M., Sagdeev R. Z. Vvedenie v nelinejnuju fiziku: ot majatnika do turbulentsnosti i haosa. M., 1988.
7. Zel'dovich Ja.B. Rassejanie i izluchenie kvantovoj sistemoj v sil'nom elektromagnitnom pole // Us. fiz. Nauk. 1973. T. 110. S. 139–151.
8. Landau L. D., Lifshits E. M. Teoreticheskaja fizika. T. 3: Kvantovaja mehanika (nereljativistskaja teorija). M.: Fizmatlit, 2001.
9. Landau L. D., Lifshits E. M. Teoreticheskaja fizika. T. 3: Teorija polja. M.: Fizmatlit, 2001.
10. Landau L. D., Lifshits E. M. Teoreticheskaja fizika. T. 1: Mehanika. M.: Fizmatlit, 2001.
11. Ljaptsev A. V. Simmetrija reguljarnyh i haoticheskikh dvizhenij v zadachah nelinejnoj dinamiki. Uravnenie Duffinga. // Izvestija RGPU im. A. I. Gertsena. Estestvennye i tochnye nauki. 2013. № 157. S. 24–34.

12. *Ljaptsev A. V.* Simmetrija reguljarnyh i haoticheskikh dvizhenij v zadachah nelinejnoj dinamiki. Rotor v periodicheskom pole // *Izvestija RGPU im. A. I. Gertsena: Estestvennye i tochnye nauki.* 2014. № 165.

13. *Petrashen' M. I., Trifonov E. D.* Primenenie teorii grupp v kvantovoj mehanike. M.: Knizhnyj dom «LIBROKOM», 2010. 280 s.

*К. У. Бобохужаев, А. В. Марченко,  
Н. П. Серегин, А. В. Шалденкова*

## АТОМНЫЕ ЗАРЯДЫ В РЕШЕТКАХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ $YBa_2Cu_3O_7$ И $YBa_2Cu_4O_8$

*Заряды атомов во всех узлах решеток  $YBa_2Cu_3O_7$  и  $YBa_2Cu_4O_8$  найдены с использованием мессбауэровских данных на изотопах  $^{67}Cu(^{67}Zn)$  и  $^{67}Ga(^{67}Zn)$ , расчетов решеточного градиента электрического поля (ГЭП) в узлах и литературных данных по ЯМР/ЯКР на изотопе  $^{17}O$ . Эти заряды соответствуют дырке, находящейся преимущественно в подрешетке цепочечного кислорода.*

**Ключевые слова:** мессбауэровская спектроскопия, ЯКР, градиент электрического поля.

*К. Bobokhujayev, A. Marchenko, N. Seregin, A. Shaldenkova*

### Atomic Charges in $YBa_2Cu_3O_7$ and $YBa_2Cu_4O_8$ Superconductor Lattices

*The atomic charges for all sites of the  $YBa_2Cu_3O_7$  and  $YBa_2Cu_4O_8$  lattices have been found using Mössbauer data with the  $^{67}Cu(^{67}Zn)$  and  $^{67}Ga(^{67}Zn)$  isotopes, calculations of the lattice electric field gradient (EFG) at the lattice sites, as well as the  $^{17}O$  NMR/NQR data which are available in literature. The charges show holes placed in the chain oxygen sublattice mainly.*

**Keywords:** Mössbauer spectroscopy, atomic charges.

Эффективные заряды атомов, их электронная структура и пространственное распределение электронных дефектов (электронов и дырок) в кристаллических решетках определяют явление высокотемпературной сверхпроводимости металлоксидов меди типа  $YBa_2Cu_3O_7$  и  $YBa_2Cu_4O_8$ . Эта информация может быть получена в результате анализа тензора энергии квадрупольного взаимодействия, описывающего взаимодействие электрического квадрупольного момента ядра-зонда с градиентом электрического поля (ГЭП) на ядре. Наиболее наглядно это делается путем сравнения экспериментально определенных параметров тензора ГЭП с результатами их теоретического расчета.

Имеются два источника ГЭП на ядрах атомов-зондов: ионы кристаллической решетки (кристаллический (решеточный) ГЭП) и несферические валентные электроны (валентный ГЭП) атома-зонда. Теоретический расчет тензора ГЭП может быть проведен методом плоских волн в приближении локальной плотности (рассчитываются параметры тензора суммарного ГЭП) [9; 7], а также в рамках модели точечных зарядов (рассчитываются параметры тензора кристаллического ГЭП [2; 3]. Однако лишь расчет кристаллического ГЭП достаточно надежен, поскольку для таких расчетов необходимы только рентгеноструктурные данные и не требуется введения априорных допущений об электронной структуре материала.