

具有经典混沌转变系统的能谱性质

耦合自旋模型的数值计算

蒋亦民

中国原子能科学研究院, 北京 102413

1992 年 12 月 14 日收到

用数值方法研究了一耦合自旋模型的最近邻能级间距涨落和能级随参数变化曲线的免交叉行为. 计算结果表明, 当变化参数, 系统的经典运动出现从规则→混沌→规则的转变时, 间距涨落分布 $P(s)$ 的 Brody 参数很好地反映了混沌区域在相空间中占据的比例. 在有大量混沌运动的参数范围里, 计算观察到了大量的免交叉及它们的重叠, 并且能级曲线图呈现相对无规的形貌. 这些结果被看作经典混沌在量子能谱中的表现或痕迹.

PACC: 0545; 7800

一、引 言

当一个量子动力学系统的经典对应出现混沌运动时, 它的半经典量子化理论将变得非常复杂和困难. 半经典理论指的是利用经典运动轨道来计算一些量子性质, 如量子格林函数, 能谱分布等等. 这些半经典公式应在普朗克常数 $\hbar \rightarrow 0$ 的极限下给出与严格量子理论计算接近的结果. 近 10 多年来, 经典混沌轨道的量子化问题有很大的进展, 主要表现为基于 Gutzwiller 理论上的一系列工作^[1]. 从这些理论工作, 我们可以相信, 无论对混沌的或可积的系统, 它的量子性质与对应的经典运动之间都有联系. 因此, 当经典运动的行为发生大的变化时, 如从规则的变到混沌的, 将带来某些量子行为的变化. 这样, 可以先不涉及复杂的半经典理论, 而通过大量的数值实验来观察这个效应和研究其规律.

近来, 由能谱性质来观察经典混沌带来的量子效应得到了广泛的研究^[2]. 研究能谱性质的优点是它们与具体量子表现形式无关 (即与量子 Hilbert 空间中基的选法无关), 并且能直接地与实验数据相联系. 实际上, 具体感兴趣的谱性质有两类. 一类是统计涨落性质, 如能谱中最近邻能级间距的涨落, Porter-Thomas Δ_3 统计等. 这里, 混沌运动带来所谓的能级排斥现象. 另一类是观测能级随某一参数变化的曲线. 这里, 混沌运动导致的是大量的、互相重叠的免交叉^[3]. 在本文中, 将考虑一系统在发生混沌转变的过渡区域内的谱性质, 并定性地或定量地考察它们是如何与经典混沌度相联系的.

我们选取的模型来自于核多体理论^[4]. 令 $a_{p\sigma}^+$ 和 $a_{p\sigma}$ 分别表示 p 态上粒子的产生和湮没算符, 其中 $\sigma = \pm 1$ 为上下能级的指标. 模型的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2} \epsilon \sum_{p\sigma} \sigma a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} + \frac{1}{4} W \sum_{pq\sigma} a_{p\sigma}^+ a_{q\sigma}^+ (a_{p-\sigma} a_{q-\sigma} - a_{-p-\sigma} a_{-q-\sigma})$$

可这样得到:在相空间中均匀随机地抽取 n 个点,然后计算出以这些点为初值的轨道的最大李雅普诺夫指数 $\sigma_\infty(n)$. 对规则轨道,数值算出的 $\sigma_\infty(n)$ 将接近于零,而对混沌轨道, σ_∞ 将明显地大于零(见图2). 如 n 为混沌轨道的数目,有 $\mu_c = n_c/n, n \rightarrow \infty$. 从图2可以看出,随着相空间中点的数目的增加, μ_c 很快地收敛到一个稳定值上.

参数化间距分布 $P(s)$ 的方法是用一些含一个参数的理论分布公式去拟合 $P(s)$. 最常用的理论分布有 Brody 公式和 Berry-Robnik 公式. Brody 公式为^[2]

$$P_b(s) = (1+b)Bs^b \exp(-Bs^{b+1}),$$

$$B = [\Gamma(\frac{2+b}{1+b})]^{1+b}, \quad (5)$$

其中 b 为 Brody 参数. 这个分布公式可以从假定最近邻能级间有比例于 s^b 的非线性排斥而推出. 当 $b=0$ 和 1 时,它分别等于著名的 Poisson 分布和 Wigner

分布. 对 $0 < b < 1$, Brody 分布介于 Poisson 与 Wigner 分布之间. Berry-Robnik 分布描述的是由一个 Poisson 谱与一个 Wigner 谱按 $(1-q):q$ 的比例叠加构成

的谱的间距分布,它的公式为^[6]

$$P_q(s) = \exp[-(1-q)s - \frac{\pi^2 q^2 s^2}{4}] [1 + q^2 + \frac{\pi^2 q^2}{2} s^2 + (1-q)R(qs)],$$

$$R(z) = 1 + \exp(-\frac{\pi^2 z^2}{4}) \operatorname{erfc}(\frac{\sqrt{\pi} z}{2}).$$

其中 q 称为 Berry-Robnik 参数. 注意参数 b 和 q 的取值范围都是在 $[0, 1]$ 区间,因此可以将它们直接与经典混沌度作比较. 如果我们用一个分布去拟合另一个分布,可以得到参数 b, q 间的关系式 $q=q(b)$.

图3 Brody 参数 b 与 Berry-Robnik 参数 q 之间的关系. 虚线为直线 $b=q$.

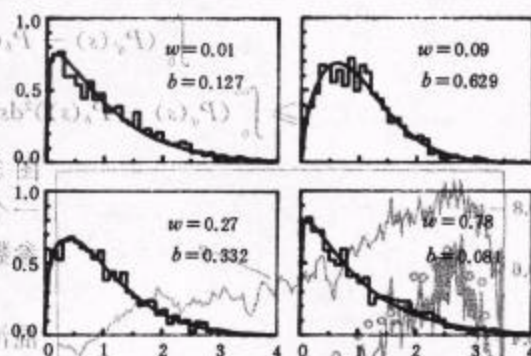


图1 模型哈密顿量(2)式的最近邻能级间距分布直方图. w 分别为 $0.01, 0.09, 0.27$ 和 0.78 . 每张直方图的统计数大约为 1500 个能级间距,它们来自于系统的 4 个对应不同不可约表示的谱, A1S, A1A, B1S 和 B1A (见文献[12]). 光滑曲线为最佳的 Brody 公式拟合结果,相应的 Brody 参数为 b

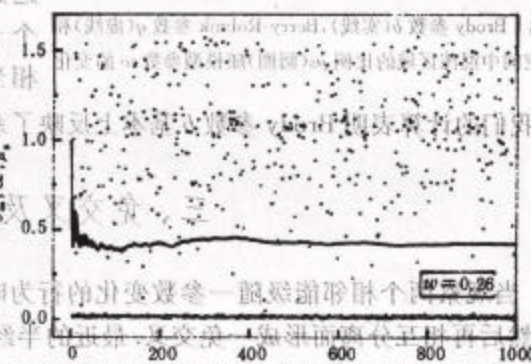


图2 相空间中不同初值 (J, L) 的最大李雅普诺夫指数

$\sigma_\infty(n)$ 和用 n 个初值算得的混沌区域的比例 $\mu_c(n)$ (实线) 和 μ_c (虚线) 随 n 的变化. $w=0.26$

图3 Brody 参数 b 与 Berry-Robnik 参数 q 之间的关系. 虚线为直线 $b=q$.

$$\int_0^\infty (P_{q'}(s) - P_b(s))^2 ds \geq \int_0^\infty (P_q(s) - P_b(s))^2 ds, \forall q' \in [0, 1]. \quad (7)$$

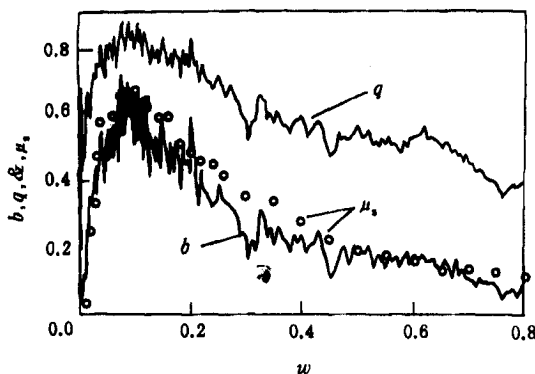


图4 Brody 参数 b (实线), Berry-Robnik 参数 q (虚线) 和相空间中混沌区域的比例 μ_s (圆圈) 随模型参数 w 的变化

图3示出这个关系图. 从图3中可以看出, 一个间距分布 $P(s)$ 对应的 Berry-Robnik 参数值要明显地大于它的 Brody 参数值.

图4示出哈密顿系统(2)式的相空间中混沌区域的比例 μ_s , 能谱的最近邻间距分布 $P(s)$ 的 Brody 参数 b 和 Berry-Robnik 参数 q 随 w 变化的情况. 从图4中可以看出, 当 w 从零开始增加时, 相空间中混沌区域的比例也开始增加. 大约在 $w=0.08$ 处, μ_s 达到最大值 ($=0.68$), 然后开始下降. 在整个 w 的变化范围里, $\mu_s(w)$ 与 $b(w)$ 符合得相当好, 而 $q(w)$ 则明显地大于 $\mu_s(w)$. 因此, 我们的计算表明 Brody 参数 b 基本上反映了系统的经典混沌区域在相空间中的比例.

三、免交叉及其重叠

当观察两个相邻能级随一参数变化的行为时, 它们之间可能出现交叉, 或先相互靠近, 然后再相互分离而形成一免交叉. 最近的半经典理论指出, 孤立的免交叉与经典动力学中的孤立共振有密切的关系^[3,7]. 当经典系统走向混沌时, 按照 Chirikov 的模型^[11], 经典共振区的宽度增加并互相重叠. 相应地, 这将在量子力学中导致某一能态同时参与多个免交叉, 即免交叉的重叠现象. 按照这些理论, 有人推测在能级曲线中, 出现大量的、互相重叠的免交叉这一现象与量子系统背后的经典混沌有关. 显然, 这个推测需要许多数值上的证据. 注意到, 出现大量的、互相重叠的免交叉能剧烈地改变能级随参数变化的走向行为, 并使谱呈现出无规性. 因此, 可以通过观测能级曲线中呈现无规形貌的区域所对应的参数范围是否与经典混沌有某些关联, 来考察数值实验是否支持上述推测. 这里, 给出耦合自旋模型的计算结果. 图5示出哈密顿系统(2)式的部分能级随 w 变化曲线. 它基本上定性地图示了前面提到的概念. 在 w 为 0.04—0.12 范围时, 从图5中可看到大量的免交叉, 而这个参数范围恰好是系统中出现较大混沌运动区域的范围. 对应于经典运动基本上是规则运动的那些参数值, 能级曲线则表现得相当规则, 只有少量的、孤立的免交叉. 通过对比图5中的相应于混沌的与规则的区域, 可以看到, 计算结果支持上面提到的可以从能级随参数变化的曲线行为中观察到经典混沌在量子系统中的表现的推测. 可惜的是, 到目前为止只能定性地使用这一方法. 由于没有定量地处理免交叉的手段, 还不能将它们与任何描述经典混沌的量作定量地比较. 这与经典混沌在量子系统的本征波函数上的体现有些类似. 在那里, 经典混沌能使本征波函数的节点呈无规的形貌^[8]. 而这里, 我们有经典混

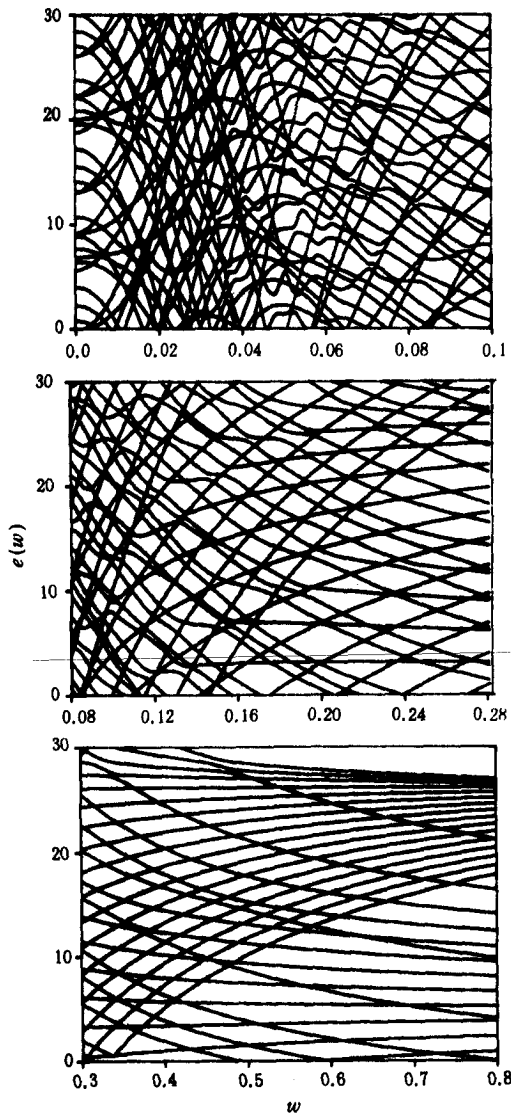


图5 能级随参数 w 变化的曲线 图中的约 30 个能级来自于—具有确定对称性的能谱的中间部分. 谱的平均间距标准为 1

沌导致的大量的、重叠的免交叉使量子能级随某一参数变化的曲线呈一种“混乱”的形貌.

四、讨 论

本文的耦合自旋模型来自于核多体理论. 对一些模型参数区域, 系统的部分相空间出现混沌运动. 我们知道, 当相空间中绝大部分区域为混沌轨道时, 对应的量子系统的最近邻谱涨落呈 Wigner 型, 而为规则轨道时, 呈 Poisson 型. 对中间的过渡情况, 关于谱统计涨落性质与经典混沌度之间否有一普遍适用的关系, 数值实验报道则较少. 我们的数值结果很明确地表明, 对模型哈密顿量(2)式, 是 Brody 参数 b , 而不是 Berry-Robnik 参数 q , 表示了相空间中混沌区域的比例 μ , 即 $b \sim \mu$. 这意味着部分混沌带来的是能级间的非线性排斥 s^b , 而不是简单地 Wigner 谱与 Poisson 谱的叠加. 这一结论与 Terasaka 等人对另一模型作的数值工作相一致^[9]. 但是, Zimmermann 等人对一耦合的振子模型作的计算得到的是 μ 接近于 Berry-Robnik 参数的结论^[10]. 这些数值结果似乎排除了 μ 与谱涨落分布 $P(s)$ 之间存在一种普适关系的可能. 目前, 我们需要更多的、对不同模型系统作的数值计算来进一步澄清对哪些系统有 $\mu \sim b$, 哪些有 $\mu \sim q$, 或其它情况.

通过在某一能量区间内绘出能级随参数变化的曲线, 观察到了经典混沌带来的

痕迹. 对应于规则的经典运动, 能级曲线有很规则的结构, 对应于混沌区域, 能级曲线则呈混乱的形貌. 从这样的绘图中可以看出, 混乱的形貌是由于出现大量的免交叉及其它们的重叠而引起的. 这定性地支持一些建立在半经典理论上的推测. 按照半经典研究的一些结论, 免交叉对应于经典共振, 并且免交叉间距对应于共振宽度. 当系统走向混沌, 经典共振的宽度增加, 在共振区有可能容纳两个或两个以上的能级, 即出现免交叉重叠, 并带来能级曲线的相对混乱的形貌. 在这方面进一步的数值工作在于找出一种量度免交叉等结构的方法, 使得能定量地检验能级曲线的形貌与经典混沌度之间的关联情况. 我们将在今后

的研究中考虑这个方案. 能量大的系统所
能"吊起"的一星曲线由引变变为一星曲线

- [1] M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer, New York, 1990).
- [2] A. Shudo, *Prog. Theor. Phys. Supplement*, **98**(1989), 173.
- [3] D. W. Noid, M. L. Koszykowski and R. A. Marcus, *Chem. Phys. Lett.*, **73**, 61980, 269.
- [4] Liao Jizhi, *Science in China*, **A34**(1991), 1079.
- [5] E. Heller, H. Koppel and L. S. Cederbaum, *Chem. Phys. Lett.*, **101**(1983), 215.
- [6] M. V. Berry and M. J. Robnik, *J. Phys. A*, **17**(1984), 2413.
- [7] D. W. Noid, M. L. Koszykowski and R. A. Marcus, *J. Chem. Phys.*, **78**(1983) 4018; T. Uzer, D. W. Noid and R. A. Marcus, *J. Chem. Phys.*, **79**(1983), 4412.
- [8] E. J. Heller, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 1515.
- [9] T. Terasaka and T. Matsushita, *Phys. Rev.*, **A32**(1985), 538.
- [10] Th. Zimmermann, H. Koppel, E. Heller, H. D. Meyer and L. S. Cederbaum, *Physica Scripta*, **35**(1987), 125.
- [11] B. V. Chirikov, *Phys. Rep.*, **52**(1979), 263.
- [12] Jiang Yimin and Liao Jizhi, *Mod. Phys. Lett. B*, to be published.

重星曲线由引变变为一星曲线
快, 即其曲线由引变变为一星曲线
面, 其曲线由引变变为一星曲线

SPECTRAL PROPERTIES OF A SYSTEM IN TRANSITION TO CLASSICAL CHAOS

NUMERICAL RESULTS ON COUPLED SPIN MODEL

JIANG YI-MIN

Institute of Atomic Energy, Beijing 102413

(Received 14 December 1992)

ABSTRACT

This article presents numerical results on the distribution of nearest-neighbor level spacings and the avoided crossing behavior of quantum energy curves for a coupled spin model coming from nuclear many body theory. When the system undergoes a transition from classical regular to chaos and then to regular as varying a model parameter, the Brody parameter of the level spacing distribution $P(x)$ could be fairly associated to the fraction of classical chaotic trajectories in phase space. In the regime of parameters with large chaotic regions, a number of overlapping avoided crossings were discovered from the results of computations, which lead the energy curves looked irregular. These results are considered as quantum manifestation or scars of classical chaos in spectrum.

量子力学中, 能量本征值的分布与经典力学中相空间的混沌运动密切相关。本文研究了耦合自旋模型的量子能量曲线在从经典正则到混沌再到正则的过渡过程中, 最近邻能级间距分布和避免交叉行为。当系统参数变化时, 经典混沌区域的比例与布罗迪参数 $P(x)$ 有很好的对应关系。在混沌区域较大的参数范围内, 发现了大量的重叠避免交叉现象, 导致能量曲线呈现出不规则的特征。这些结果被认为是经典混沌在量子谱中的表现或疤痕。

关键词: 量子力学; 能量本征值; 最近邻能级间距分布; 避免交叉; 经典混沌; 布罗迪参数; 耦合自旋模型