Письма в ЖЭТФ, том 41, вып. 2, стр. 55 – 58 *25 января 1985 г.*

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Е.Б.Богомольный

Предложено описывать распределение расстояний между соседними уровнями энергии квантовых систем в виде некоррелированной суперпозиции распределений Ландау – Вигнера – Дайсона для нерегулярных частей спектра и Пуассона для регулярной части.

1. Рассмотрим некоторую квантовомеханическую систему с дискретным спектром. Построим функцию распределения расстояния между соседними уровнями энергии $p(t)$ из условия, что $p(\rho S)\rho dS$, где ρ – плотность уровней данного участка спектра, есть доля уровней, для которых расстояние до соседнего уровня лежит в интервале между S и $S + dS$. Эта функция впервые была введена для описания высоковозбужденных состояний тяжелых ядер (см. [1] и ссылки в нем). В настоящее время она широко используется в различных задачах даже с небольшим числом степеней свободы. Интерес к ней вызван тем, что ее поведение тесно связано с проблемой квазиклассического квантования неинтегрируемых систем [2, 3]. С физической строгостью функция распределения известна в двух предельных случаях:

$$p(t) \approx \begin{cases} \exp(-t) & \text{для классически интегрируемых систем} \quad (1а) \\ \dfrac{\pi}{2} t \exp\left(-\dfrac{\pi}{4}t^2\right) & \text{для эргодических систем} \quad (1б) \end{cases}$$

Однако системы общего положения не принадлежат ни к одному из этих случаев. Простым примером таких систем может служить система с гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + q_1^2) + \frac{1}{2}(p_2^2 + q_2^2) + 4kq_1^2q_2^2 , \qquad (2)$$

который описывает массивные поля Янга – Миллса, зависящие от одной переменной [4]. В работе [5] численно найдены уровни энергии для этой системы и построены гистограммы распределения расстояний между соседними уровнями в разных участках спектра при различных значениях константы связи k. Оказалось, что все распределения хорошо аппроксимируются функцией

$$p_q(t) = (1+q)\beta t^q \exp(-\beta t^{1+q}), \qquad \beta = \{\Gamma((2+q)/(1+q))\}^{1+q}, \tag{3}$$

предложенной ранее для подгонки распределений соседних уровней тяжелых ядер [1], причем параметр q оказался гладкой функцией от классического параметра kE. Настоящая статья посвящена построению функции распределения подобных систем, исходя из свойств их классического фазового пространства.

2. Известно, что для типичных гамильтоновых систем с $N \geqslant 2$ степенями свободы фазовое пространство может быть разбито на сложно устроенные множества двух типов [2,3,6,7]:

а) регулярное множество, которое состоит из точек, лежащих на инвариантных торах, как для интегрируемых систем;

б) нерегулярное множество, в котором все траектории неустойчивы, что приводит к очень сложному (даже стохастическому) поведению типичных траекторий, почти все из которых эргодичны на $(2N-1)$-мерном множестве.

С каждым таким множеством, фазовый объем которого $\gtrsim h^N$, где h — постоянная Планка, свяжем систему квазиклассических уровней, число которых в данном участке спектра пропорционально фазовому объему этого множества. При этом с регулярным множеством будет связана система регулярных уровней, мало чем отличающихся от уровней интегрируемых систем. В частности, можно показать, что интеграл перекрытия двух регулярных волновых функций, входящий в формулу для расталкивания двух уровней с близкой энергией, мал, и функция распределения имеет вид (1а). В свою очередь с нерегулярной областью связана система нерегулярных уровней, для которых интеграл перекрытия велик и $p(t)$ близко к (1б). Так как различные множества считаются непересекающимися, интеграл перекрытия уровней из различных областей мал и эти уровни не испытывают заметного отталкивания. При изучении интеграла перекрытия удобно использовать формализм функции Вигнера [2], которые в квазиклассическом приближении согласно [2] отличны от нуля только вблизи области эргодичности типичной классической траектории.

3. Таким образом, высокие уровни энергии квантовых систем можно разбить на группы, связанные с регулярными и нерегулярными множествами фазового пространства. В i-той группе вероятность того, что соседний уровень из этой же группы лежит между S и $S+dS$, известна и равна $p_i(\rho_i S)\rho_i dS$, где ρ_i — плотность уровней данной группы, $p_i(t)$ — функция распределения. Для регулярных уровней $p_i(t)$ дается (1а), для нерегулярных — (1б). Результирующее распределение любых соседних уровней получается в виде некоррелированной суперпозиции функций распределения всех групп.

4. Для определения этого распределения, следуя [8], для каждой группы уровней построим функции:

$$F_i(t) = \int_0^t p_i(y)dy, \qquad E_i(t) = \int_t^\infty (1 - F_i(y))dy \tag{4}$$

$F_i(t)$ есть вероятность того, что расстояние между уровнями i-той группы $\leqslant t$, $E_i(t)$ — вероятность того, что интервал длины t свободен от уровней i-той группы. Зная $E_i(t)$ для всех групп, построим две новые функции

$$E(t) = \prod_i E_i(f_i t), \qquad p(t) = \frac{d^2 E(t)}{dt^2}, \tag{5}$$

где $f_i = \rho_i/\rho$, $\rho = \sum_i \rho_i$ — полная плотность всех уровней ($\sum f_i = 1$). Из независимости уровней разных групп следует, что $E(t)$ — вероятность того, что интервал длины t свободен от уровней всех групп, а $p(t)$ — искомая функция распределения всех соседних уровней.

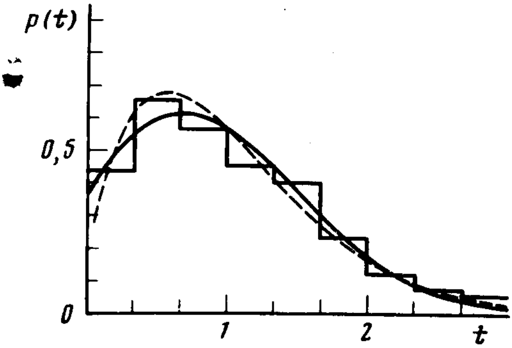

Рис. 1

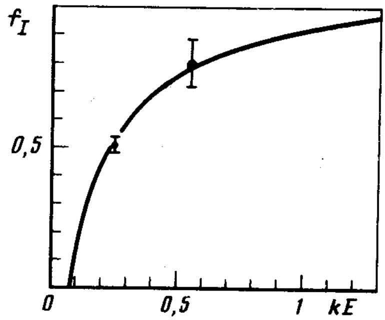

Рис. 2

Рис. 1. Распределение расстояний между соседними полностью симметричными уровнями для системы (2) при $k = 0{,}005$ и $85 < E < 135$. Гистограмма – численное распределение 469 уровней, полученное в [5]. Пунктирная линия – подгоночная формула (3) с $q = 0{,}548$ из [5]. Сплошная линия – распределение (6) с вычисленным значением $f_I(0{,}55) \approx 0{,}8$

Рис. 2. Зависимость доли фазового объема, занятого нерегулярной областью, от параметра kE для системы (2). Сплошная линия – результат пересчета зависимости $q(kE)$ из работы [5]. Точки – результаты прямых вычислений

5. Величина f_i в (5) есть относительная плотность уровней в i-той группе. В квазиклассическом приближении она равна доле фазового объема данного участка спектра, занятого i-тым множеством траекторий,с учетом дискретной симметрии задачи и зависит только от параметров классической задачи. Число сомножителей в (5) равно числу непересекающихся регулярных и нерегулярных множеств. Однако, можно показать, что конечный результат зависит от суммарного объема, занятого инвариантными торами, и не зависит от сложной структуры регулярного множества. Для систем с двумя степенями свободы существует бесконечное число нерегулярных областей с уменьшающимся фазовым объемом [6, 7]. Два обстоятельства ограничивают рост числа областей: 1) для задач квантовой механики области объемом меньше h^N можно не рассматривать, 2) если существует n нерегулярных областей, для которых $f_i \to 0$, но $\sum_i f_i$ ограничена, то функция распределения соответствующих уровней при $n \to \infty$ стремится к (1а). Для систем с $N > 2$ степенями свободы, по-видимому, всегда существует только одна нерегулярная область[6,7].

Таким образом,в $E(t)$ в (5) входит один сомножитель с функцией распределения (1а), который отвечает регулярному множеству и мелким нерегулярным множествам, и один или несколько сомножителей, отвечающих крупным нерегулярным множествам, для которых $p_i(t)$ дается (1б). Приведем явный вид функции распределения (5) для частного случая одной нерегулярной области:

$$p(t) = \left(y\left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} f_I t\right) f_R^2 + \frac{\pi}{2} t f_I^3 + 2 f_I f_R \right) \exp\left(-f_R t - \frac{\pi}{4} f_I^2 t^2\right), \tag{6}$$

где $y(z) = 2/\sqrt{\pi}\exp(z^2)\int_z^\infty \exp(-t^2)dt$, f_I – доля фазового объема данного участка спектра, занятого нерегулярной областью (с учетом симметрии задачи), $f_R = 1 - f_I$.

Формула (6) представляет собой основной результат этой работы.

6. Сравним (6) с функцией (3), часто используемой для подгонки экспериментальных распределений соседних уровней [1, 5]. При всех $0 \leqslant q \leqslant 1$ можно выбрать $f_I(q)$ так, что разность между функциями (6) и (3) будет мала всюду, кроме небольшой области вблизи $t = 0$ (см. рис. 1). Имеющейся точности недостаточно, чтобы надежно отличить одну функцию от другой. На рис. 2 приведена зависимость f_I от kE для модели (2), полученная из зависимости q от kE (см. рис. 2,б работы [5]). На этом же рисунке указаны несколько значений f_I, найденные путем прямого численного вычисления доли фазового объема,

занятого нерегулярной областью. Для определения этой величины поверхность постоянной энергии была разбита на небольшие ячейки и было вычислено число ячеек, через которые проходит типичная нерегулярная траектория за большое время. Указанные на рисунке ошибки связаны с ограниченностью числа разбиений и времени счета и могут быть существенно уменьшены при более длительных вычислениях.

7. В заключение подчеркнем, что, несмотря на определенную грубость предположений, лежащих в основе вывода функции распределения (6), она имеет ясный физический смысл и аппроксимирует результаты работы [5] не хуже подгоночного распределения (3). Важное свойство распределения (6) состоит в том, что для простых систем типа (2) оно допускает независимое вычисление, для чего достаточно найти фазовые объемы, занятые различными нерегулярными множествами.

Автор благодарен Д.Е.Хмельницкому за многочисленные полезные обсуждения и Л.Н.Щуру за помощь в проведении численных расчетов.

Литература

1. *Brody et al.* Rev. Mod. Phys., 1981, **53**, 385.
2. *Berry M.V.* Aspects of semiclassical mechanics. Proc. of the 1981 Les Houches Summer School, North-Holland, 1982.
3. *Percival I.C.* Adv. Chem. Phys., 1977, **36**, 1; *Заславский Г.М.* УФН, 1979, **129**, 211.
4. *Матинян С.Г., Саввиди Г.К., Тер-Арутюнян-Саввиди Н.Г.* Письма в ЖЭТФ, 1981, **34**, 613.
5. *Haller E., Köppel H., Cederbaum L.S.* Phys. Rev. Lett., 1984, **52**, 1665.
6. *Арнольд В.И.* Математические методы классической механики. М.: Наука, 1974.
7. *Chiricov B.V.* Phys. Rep., 1979, **52**, 263.
8. *Mehta M.L.* Random matrices and the statistical theory of energy levels. N.-Y. Academic Press, 1967.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
22 октября 1984г.
3 декабря 1984 г