

# 量子不可积性和随机矩阵理论

徐躬耦

(南京大学物理系 南京 210008)

**摘 要** 本文概述了量子不可积性的拓扑观. 按拓扑观点探讨了量子体系完全可积的条件, 通向不可积的机制, 以及在量子不可积条件下的能谱性质, 从动力学角度阐明了随机矩阵理论的基础, 还简要讨论了这些理论在核结构问题中的应用.

**关键词** 量子不可积性, 随机矩阵理论.

经典混沌运动研究的长足进展促使人们以巨大的热情去探讨量子混沌运动. 但由于测不准关系, 对于经典混沌运动的一些基本特征很难找到它的量子对应. 迄今为止, 对量子混沌运动还没有能为大家共同接受的定义. 实际上, 混沌运动是对照规则运动而言的, 从给出规则运动的可积条件的破坏入手去进行研究, 应是更基本的途径. 在本文中我们将扼要介绍沿这一途径的研究工作.

## 1 量子体系完全可积的充要条件

量子体系的状态空间决定于体系的动力学群  $G$ . 相应于动力学群  $G$  的某个子群链有一组完备的可互易量  $I_\alpha^{(0)}$ , 其数目等于动力学自由度数目. 它们相当于作用量, 有共同本征态  $|m\rangle$ .

$$I_\alpha^{(0)}|m\rangle = g_\alpha m|m\rangle \quad (1)$$

任意时刻的状态  $|\psi(t)\rangle$  可按线性叠加原理以  $|m\rangle$  为基矢展开

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m C(m,t)|m\rangle \quad (2)$$

量子体系的状态空间就是这样的一切可能的状态的集合, 和经典体系的相空间相应.

量子状态  $|\psi(t)\rangle$  的演化遵循薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H|\psi(t)\rangle \quad (3)$$

为考虑保守体系,  $|\psi(t)\rangle$  可形式地写为

$$|\psi(t)\rangle = U(t,0)|\psi(0)\rangle \quad (4)$$

如体系可积, 则其哈密顿量  $H^{(0)}$  与动力学群  $G$  的某个子群链相应的一组完备的可互易量互易, 这组可互易量是体系的运动积分. 我们把本征能量处在一定能理范围内的本征态为基矢的子空间称为能量壳, 在可积情形下, 任何一个能量壳内的状态还可以进一步按能量以外的运动积分划分子空间. 只要波包在初始时刻处在能量壳的确定子空间中, 波包以后的运动将始终处在这个子空间中, 波包的运动是规则的.

我们还要进一步明确这种波包运动在极限条件下的表现. 我们知道诺伊曼方程

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = H\rho(t) - \rho(t)H \quad (5)$$

$$\text{附加条件 } (\rho(t))^2 = \rho(t) \quad (6)$$

之后, 等价于薛定谔方程. 在极限条件下, 它们分别化为

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho_w(q, p; t)}{\partial t} \\ & = \sum_i \left( \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q_i} \right) \rho_w(q, p; t) \end{aligned} \quad (7)$$

$$\rho_w(q, p; t) \rho_w(q, p; t) = \rho_w(q, p; t) \quad (8)$$

这里  $\rho_w(q, p; t)$  是维格纳函数, 不是正定的. 但在极限条件下, 在可积情形时,  $\rho_w(q, p; t)$  可换成可具体观测的平均后的量  $\rho(q, p; t)$ , 相应于经典的几率密度函数. 这样(7)式就是刘吾维方程, (8)式要求  $\rho(q, p; t)$  取  $\delta$  函数形式

$$\rho(q,p;t) = \delta(q - q(t))\delta(p - p(t)) \quad (9)$$

把它和刘吾维方程联合起来考虑, 得到哈密顿方程. 由此可见: 在极限条件下, 波包在状态空间中的运动的确表为相点在相空间中的轨迹. 而在经典的可积保守体系, 相点的轨迹不仅限于确定的能量面上, 而且还可限于能量面的确定不变环面上. 由此可见, 限于某能量壳的一个子空间中运动的波包, 在经典极限下, 化为限于某能量面的不变环面上运动的相点. 基于这种量子经典对应, 完全有理由确认: 保守的量子体系的完全可积, 以全部能量范围内的能量壳能够进一步按能量外的运动积分划分子空间为充要条件.

## 2 量子可积条件的局部破坏

探讨量子体系  $H$  是否可积, 就要考查其能量壳是否像可积体系  $H^{(0)}$  的能量壳那样, 具有可进一步按能量以外的运动积分划分子空间的性质. 这是一个典型的拓扑学问题.

这里第一个问题是需要给出可积的  $H^{(0)}$  的本征态与所研究的  $H$  的本征态之间的一对一的映射. 可以将  $H$  表为

$$H = \sum_{m,n} |m\rangle \langle m|H|n\rangle \langle n| \quad (10)$$

并取  $H^{(0)}$  为

$$H^{(0)} = \sum_m |m\rangle \langle m|H|m\rangle \langle m| \quad (11)$$

将扰动

$$V = \sum_{m \neq n} |m\rangle \langle m|H|n\rangle \langle n| \quad (12)$$

逐渐加强, 使

$$H(\lambda) = H^{(0)} + \lambda V \quad (13)$$

按迭代微扰进行计算, 可得到

$$|\psi_s(\lambda)\rangle = |S\rangle + \frac{1}{E_s(\lambda) - H^{(0)}} \cdot (1 - |S\rangle \langle S|) \lambda V |\psi_s(\lambda)\rangle \quad (14)$$

$$E_s(\lambda) = \frac{\langle \psi_s(\lambda) | H(\lambda) | \psi_s(\lambda) \rangle}{\langle \psi_s(\lambda) | \psi_s(\lambda) \rangle} \quad (15)$$

把(14)式改写为

$$|\psi_s(\lambda)\rangle = R(\lambda, 0) |S\rangle$$

$$R(\lambda, 0) = \left[ 1 - \frac{1}{E_s(\lambda) - H^{(0)}} \cdot (1 - |S\rangle \langle S|) \lambda V \right]^{-1} \quad (16)$$

就是所需的映射.

第二个问题是映射是否保持拓扑不变性质, 如连通性. 在经典极限情形, 能量壳的连通性是不言而喻的. 在束缚态能量是离散的情形下, 应考虑平移条件,

$$\langle \psi_s(\lambda) | \psi_s(\lambda + \varepsilon) \rangle = 1 + O(\varepsilon^2) \text{ 或}$$

$$\langle \psi_s(\lambda) | \frac{d}{d\lambda} | \psi_s(\lambda) \rangle = 0 \quad (17)$$

这样, 才能在经典极限下满足连通性要求.

扰动不大时, 迭代计算收敛(16)式所示的映射满足(17)所示的连通性要求.  $H$  的能量壳和  $H^{(0)}$  的相应能量壳同胚, 可看到  $|\psi_s(\lambda)\rangle$  是下面这组可互易量的共同本征态,

$$I_{\alpha}(\lambda) |\psi_s(\lambda)\rangle = R(\lambda, 0) I_{\alpha}^{(0)} R^+(\lambda, 0) |\psi_s(\lambda)\rangle = I_{\alpha, s} |\psi_s(\lambda)\rangle \quad (18)$$

故  $H$  的能量壳可同样按能量以外的运动积分划分为子空间. 这种性质是对于动力学群  $G$  而言的不变性质, 故可以称这种子空间为不变子空间, 与经典的不变环面相应.

扰动逐渐增大超过某一  $\lambda_1$  值时, 可能发生下述情况: 虽能通过一定途径得到迭代计算结果, 但对其中二相邻状态不能满足条件(17). 为了保持连通性, 就必须在  $R(\lambda, 0)$  之外再附加一置换. 这样确定的能量壳内的状态, 不再像(18)式那样, 是一组可互易量的共同本征态, 故不能再像  $H^{(0)}$  的能量壳那样进一步划分为不变子空间.  $H$  的可积性开始受到局部破坏.

发生这种情形的  $\lambda_1$  值是(16)式的奇点. 所以发生这种情形是由于这两个状态在其余状态影响下处于一种临界条件, 扰动的些微改变, 导致最后结果的巨大改变. 为了保持连通性附加一置换后的结果,  $E_s(\lambda)$  虽连续,

但它的微商不连续, 表现为所谓的免交叉.

### 3 量子可积条件的大范围破坏, 量子不可积性在大范围内的实现

前已指出, 为了保持连通性, 必须用下述步骤

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} |\psi_S(\lambda_1 - \varepsilon)\rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} |\psi_S(\lambda_1 + \varepsilon)\rangle \quad (19)$$

来确定  $|\psi_S(\lambda_1 + \varepsilon)\rangle$  在  $\lambda_1$  以后, 可以像前面那样作迭代微扰计算, 直到某一  $\lambda_2$  值再次发生同胚性质的破坏为止. 依次类推, 一般地有

$$U(1,0) = [R(1,\lambda_r)][R(\lambda_r,\lambda_{r-1})] \cdots [R(\lambda_2,\lambda_1)][R(\lambda_1,0)] \quad (20)$$

这里不同括号内的  $R$  用不同的基表示, 这些基都像(19)式那样确定, 但为简明起见, 未具体写出. 由于在  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_r$  发生了一系列的免交叉,  $H$  与  $H^{(0)}$  的相应的能量壳的拓扑性质有很大差异. 特别当相继发生的免交叉彼此重叠、连成一片时, 导致状态在大范围内的强混杂. 将  $|\psi_S\rangle$  按  $H^{(0)}$  的本征解  $|m\rangle$  展开,

$$|\psi_S\rangle = \sum |m\rangle \langle m|U(1,0)|S\rangle \quad (21)$$

展开系数  $\langle m|U(1,0)|S\rangle$  有如下性质: (1)  $|\langle m|U(1,0)|S\rangle|^2$  做大范围近乎均匀的分布; (2)  $\langle m|U(1,0)|S\rangle$  的位相因子随  $m$  无规变化, (3) 上述性质基本上与  $S$  无关, 其中第一条性质可通过熵来表述

$$S_n = - \sum_m |\langle m|U|n\rangle|^2 \ln |\langle m|U|n\rangle|^2 \quad (22)$$

$$M_n = \exp[S_n] \quad (23)$$

由于第三条性质,  $M_n$  和一定范围内的平均值  $M$  相近.

现在我们将进一步明确可积性大范围破坏的条件. 由于测不准关系, 要考察波包的演化, 必须要求波包有足够大的能散, 相对于平均能级间距  $D$  而言, 应有

$$\Delta E \gg D \text{ 或 } \Delta N = \Delta E / D \gg 1 \quad (24)$$

所以可积性大范围破坏的条件应是

$$M \gg \Delta N \gg 1 \quad (25)$$

上面的讨论是从相应于动力学群的某一子群链的一个可积的  $H^{(0)}$  出发, 再选定  $H(\lambda)$  来进行讨论的. 但可以证明关于体系  $H$  的可积性大范围破坏的结论, 不依赖于同属一类的可积体系  $H^{(0)}$  和相应的  $H(\lambda)$  的选择. 所以应对一切可能的子群链进行同样的讨论, 证明相应的可积性均已被大范围破坏时, 才能认为该量子体系  $H$  是大范围不可积的, 其行为才具有统计规律性, 在经典极限下一定表现出混沌运动.

### 4 大范围不可积量子体系的能谱的统计规律

可积量子体系的运动是规则运动, 大范围不可积量子体系的运动则应是混沌运动. 像规则运动一样, 混沌运动也可按定态和非定态来讨论, 本文限于篇幅, 只讨论大范围不可积量子体系的能谱这种定态性质.

和可积量子体系截然不同, 本征能量已无法表为一组守恒量的量子数的函数, 故不再有通常的那种规律性, 这只是问题的一面. 问题的另一面是: 能谱的涨落又遵循一定的统计规律.

在(25)式所示条件下,  $H$  的能谱按不同区间考虑平均性质时, 平均能级间隔随能量缓慢变化, 总可选适当的可积体系  $H^{(0)}$ , 只要让参数缓慢地随能量变化, 就能用它的能谱的平均性质去拟合  $H$  的能谱的平均性质. 但是企图用相应的模型空间, 引入等效哈密顿量  $H_{\text{eff}}$  来进一步给出区间内能谱的平均性质, 是无法做到的. 由于大范围强混杂, 等效哈密顿量

$$H_{\text{eff}} = U^\dagger(1,0) H U(1,0) \quad (26)$$

所含的具体信息远超过  $\Delta N$  维厄密矩阵的容量, 所以对于模型空间中的任何基矢系而言, 等效哈密顿量矩阵的各独立元素之间几乎没有什么关联. 对它们所了解的唯一具体知识是: 各个区间的等效哈密顿量矩阵各自

表述的能谱的平均性质。做如下的处理：移动能量原点，使给出的平均能量都等于零；改变能量标尺，使给出的平均能级间距都等于 1；再进一步不管它们来自哪个能量区间，把它们同等看待。则处理后的这些等效哈密顿量矩阵的集合就成为一个随机矩阵系综。对它们只有两点与具体量子体系无关的知识：(1) 等效哈密顿量矩阵的各独立元素是彼此独立的随机变量；(2) 上述性质对于模型空间的正交基矢系的选择无关。除此以外，则一无所知。因此，可以在一定限制条件下，按最大信息熵原理给出随机矩阵系综的分布规律。通常考虑的量子体系的哈密顿量具有对时间反演的不变性，等效哈密顿量矩阵是实对称矩阵，所给出的随机矩阵系综分布规律是：

$$P(\overline{H}_{\text{eff}}) = (4\pi a^2)^{-\Delta N(\Delta N+1)/4} \cdot \exp\left\{-\frac{J_r \left[\overline{H}_{\text{eff}}\right]^2}{4a^2}\right\} \quad (27)$$

其中  $\overline{H}_{\text{eff}}$  是处理过的等效哈密顿量矩阵，参量  $a$  要求给出调整后的平均能级间距等于 1。这种系综通常称为高斯正交系综。

## 5 理论在核结构中的应用

最后简要谈谈理论在核结构中的应用。

原子核是一个强相互作用下的多核子体系。但在低激发态，由于泡利原理的抑制，可以考虑为独立核子体系，适用自洽场理论。对不同情形还可以计及残余相互作用而改进平均场。例如在唯象理论中，从球形势场到变形势场，再进一步到推转变形势场，就体现这种精神。对低激发态而言，是局部可积的，故可采用模型空间和等效哈密顿量来描写，各种集体运动模型，都体现这种精神。

在原子核的高激发态，如中子共振区的复合核状态，因泡利原理的抑制作用减弱，强的残余作用导致大范围内强的组态混杂。残余作用相当于热库，只能用温度有关的 HF 理论来给出平均性质，例如在唯象理论中，用费密气体模型来给出核的平均状态密度。至于能谱的统计涨落则只能由随机矩阵来解释。这里，条件(25)是重要的。莫特逊曾在 1990 年橡树岭会议的总结报告中从物理的直观考虑推断过这一条件。

## Quantum Nonintegrability and Random Matrix Theory

Xu Gongou

(Department of Physics, Nanjing University, Nanjing 210008)

**Abstract** Quantum nonintegrability is studied in a topological view. The condition for complete integrability of quantum systems and the mechanism leading to global nonintegrability are investigated. The basis of random matrix theory for describing energy spectra of nonintegrable quantum systems is clarified. Applications to nuclear structure are briefly discussed.

**Key Words** quantum nonintegrability, random matrix theory.