核物理

# 量子混沌研究中的几个疑难问题

徐躬耦
(南京大学 物理系 南京 210008)

**摘 要** 本文对量子混沌研究中的几个疑难问题进行了讨论，着眼于量子体系状态的整体性质，从量子正则变换不变性质的破坏来阐明量子混沌运动的发生，指出量子混沌与经典混沌间存在着明确的对应.

**关键词** 量子混沌， 状态整体性质， 正则变换， 量子经典对应.

随着经典混沌研究的逐步深入，量子混沌研究也就自然提上了日程. 由于量子体系存在着测不准关系，使得量子混沌与经典混沌之间的对应关系至今尚未弄清. 加上在量子力学中，以往主要着眼于单个状态性质，较少注意状态空间性质的研究，不熟悉这类研究的关键所在. 于是，出现了一些看起来颇为关键的疑问，例如：

(1)由于测不准关系，量子体系还能用一组正则变量来表达任意力学量和任意状态吗?

(2)对于量子体系能明确定义正则变换吗? 正则变换和么正变换有差别吗? 正则变换和对于初条件的稳定性有联系吗?

(3)量子体系的运动为规则的条件是什么? 量子体系的运动方程是线性的，它的相应于一定初态的随 $t$ 变化的解能够表现出规则运动条件被破坏的奇异行为吗?

这些问题之所以尖锐，是因为它们涉及到量子力学中一些最基本的问题. 不回答这些问题，就很难理出量子混沌研究的一条清晰的思路. 当然，要回答这些疑问，不是轻而易举的. 要通过不断实践不断总结，才能逐步接近正确答案. 现根据我们课题组近几年来的实践[1]，综述对于这些问题的看法.

## 1 关于量子体系的正则表示

在经典力学中，体系的正则变量 $\{q,p\}$ 是它的最基本的动力变量，任意动力变量总可表为 $\{q,p\}$ 的函数，同时又可以用 $\{q,p\}$ 来表述体系的状态. 在量子力学中，由于测不准关系，是否也有相应的正则变量，可以用来表述体系的任意动力变量和任意可能状态，还是一个尚未完满解答的问题[2]. 我们的答案是肯定的. 当然，由于测不准关系，在具体表述上会有差异.

兹以自由转子为例来说明这一问题. 让 $\hat{J}_x$、$\hat{J}_y$、$\hat{J}_z$ 表示转子的角动量沿三轴的投影，它们构成 SU(2)代数，

$$[\hat{J}_x,\hat{J}_y]_{qu} \equiv \frac{1}{i\hbar}(\hat{J}_x\hat{J}_y - \hat{J}_y\hat{J}_x) = \hat{J}_z$$

$$[\hat{J}_y,\hat{J}_z]_{qu} = \hat{J}_x$$

$$[\hat{J}_z,\hat{J}_x]_{qu} = \hat{J}_y$$

自由转子的角动量 $\hat{J}^2$ 取确定值，它和与之互易的 $\hat{J}_z$ 构成一组完备的可互易量(CSCO)[3]，

$$[\hat{J}^2,\hat{J}_z]_{qu} = 0$$

可以用它们的共同本征态为基矢系，再考虑前述代数关系来给出 $\hat{J}_x,\hat{J}_y,\hat{J}_z$ 的矩阵表示，

$$\langle jm|\hat{J}_z|jm'\rangle = m\hbar\delta_{mm'}$$

$$\langle jm|\hat{J}_x|jm'\rangle =$$
$$\frac{\hbar}{2}\Big[\sqrt{j(j+1)-m'(m'+1)}\,\delta_{m,m'+1} + \sqrt{j(j+1)-m'(m'+1)}\,\delta_{m,m'-1}\Big]$$

本文 1993 年 6 月 2 日收到.

$$\langle jm|\hat{J}_y|jm'\rangle =$$

$$\frac{\hbar}{2i}\left[\sqrt{j(j+1)-m'(m'+1)}\delta_{m,m'+1}\right.$$

$$\left.-\sqrt{j(j+1)-m'(m'+1)}\delta_{m,m'-1}\right]$$

它们是SU(2)代数的一种具体表示，由它们可给出任意力学量的矩阵表示．角动量量子数为 $j$ 的任意状态则可表示为

$$|\Psi_j\rangle = \sum_m C_{jm}|jm\rangle$$

运动方程则可表为

$$i\hbar\frac{d}{dt}C_{jm} = \sum_{m'}\langle jm|\mathrm{H}|jm'\rangle C_{jm'}$$

如状态用密度矩阵来表示，则有

$$\langle jm|\hat{\rho}|jm'\rangle = \langle jm|\Psi_j\rangle\langle\Psi_j|jm'\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle jm|\hat{\rho}|jm'\rangle = \langle jm|[\hat{H},\hat{\rho}]_{qu}|jm'\rangle$$

这里依赖SU(2)群的一组完备的可互易量和SU(2)群的代数，给出了SU(2)群生成元的矩阵表示，同时也表述了状态及决定状态演化的运动方程．虽形式上与经典力学中通过正则变量的表述有差别，但本质是一样的，而且还可以通过一定的途径直接显示出量子、经典对应关系．

考虑 Wigner 变换[4]，

$$A_w(I,\theta) = \sum_{S/\hbar=-2j}^{2j}\langle\frac{I}{\hbar}+\frac{S}{2\hbar}|\hat{A}|\frac{I}{\hbar}-\frac{S}{2\hbar}\rangle e^{-iS\theta/\hbar}$$

经计算可求得 $J_{z,w}(I,\theta) = I$

$$J_{x,w}(I,\theta) = \sqrt{\hbar^2(j+\frac{1}{2})^2 - I^2}\,\mathrm{Cos}\theta$$

$$J_{y,w}(I,\theta) = \sqrt{\hbar^2(j+\frac{1}{2})^2 - I^2}\,\mathrm{Sin}\theta$$

量子泊松括号 $[\hat{A},\hat{B}]_{qu} = \hat{C}$

则化为 Moyal 括号[5]

$$[A_w,B_w]_M \equiv A_w(I,\theta)\frac{2}{\hbar}$$

$$Sin\left[\frac{\hbar}{2}\left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial\theta}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial I}-\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial I}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial\theta}\right)\right]B_W(I,\theta) = C_W(I,\theta)$$

状态由 $\rho_W(I,\theta)$ 表述，其演化则决定于方程

$$\frac{\partial\rho_W(I,\theta;t)}{\partial t} = [H_w,\rho_w]_M$$

$$= H_w(I,\theta)\frac{2}{\hbar}Sin\left[\frac{\hbar}{2}\left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial\theta}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial I}-\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial I}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial\theta}\right)\right]\rho_w(I,\theta;t)$$

这种表示与前面所给出的距阵表示是等价的．

Wigner 函数 $\rho_w(I,\theta;t)$ 不是正定的，不同于经典的几率密度函数．只有在相胞 $2\pi\hbar$ 内粗粒化，并让 $2\pi\hbar$ 相对于体系的运动尺度趋于零，才能过渡到经典极限．这样 Wigner 函数 $A_w(I,\theta)$ 化为经典的 $A_c(I,\theta)$，$J_{z,c}(I,\theta)=I$，$J_{x,c}(I,\theta)=\sqrt{J^2-I^2}\,Cos\theta$，$J_{y,c}(I,\theta)=\sqrt{J^2-I^2}\,Sin\theta$．

分解 Moyal 括号化为经典泊松括号

$$[A_c,B_c]_{cl} \equiv A_c(I,\theta)\left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial\theta}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial I}-\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial I}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial\theta}\right)]$$

$$\cdot B_c(I,\theta) = C_c(I,\theta)$$

运动方程则化为刘吾维方程

$$\frac{\partial\rho_c(I,\theta;t)}{\partial t} = [H_c,\rho_c]_{cl}$$

$$= H_c(I,\theta)\left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial\theta}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial I}-\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial I}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial\theta}\right)]\rho_c(I,\theta;t)$$

这就是经典力学中通过正则变量 $I,\theta$ 与经典泊松括号的表示．

可以清楚地看出：通过一组 CSCO 来给出的关于量子体系的力学量和状态的表示和经典力学中通过正则变量给出力学量和状态的表示具有一一对应的关系，故以后称这样的表示为**量子正则表示**．

## 2　关于量子正则变换

对于经典体系，正则变换可有不同选择，不同正则变量间的变换保持经典泊松括号不变者为正则变换．对于量子体系是否也可以有不同的正则表示与不同正则表示间的正则变换，如何明确定义量子正则变换？

对于量子体系而言，量子正则表示的基本点是一组完备的可互易量(CSCO)．按群表示论[6]，一组完备的可互易量总与动力群的某一个子群链相应．所以动力群有若干个子群链，就有若干类 CSCO 与若干类量子正则表示．

举例说明这一问题．考虑两相互作用着的转子，其动力群为 $O(4)$，生成元可表为

$$b_i^+b_i、b_i^+\sqrt{\Omega-b_i^+b_i}、\sqrt{\Omega-b_i^+b_i}\,b_i\quad i=1,2$$

相应于第一个子群链，

$$O(4)\supset SU_1(2)\otimes SU_2(2)\supset SU_1(1)\otimes SU_2(1)$$

CSCO 为 $O(4)$ 的 Casimir 算子及 $b_1^+b_1$，$b_2^+b_2$．它们

的共同本征态是

$$|\varphi_{n_1n_2}\rangle \propto [b_1^+ \sqrt{\Omega - b_1^+b_1}]^{n_1} \cdot [b_2^+ \sqrt{\Omega - b_2^+b_2}]^{n_2}|O\rangle$$

相应于第二个子群链

$$O(4) \supset SU_{1+2}(2) \supset SU_{1+2}(1)$$

CSCO 就是 $O(4)$、$SU_{1+2}(2)$ 和 $SU_{1+2}(1)$ 的 Casimir 算子，它们的共同本征态是

$$|\varphi_{jm}\rangle \propto [b_1^+ \sqrt{\Omega - b_1^+b_1} + b_2^+ \sqrt{\Omega - b_2^+b_2}]^{j+m}|2\Omega - 2j\rangle$$

其中$|2\Omega-2j\rangle$满足下述条件

$$[\sqrt{\Omega - b_1^+b_1}\, b_1 + \sqrt{\Omega - b_2^+b_2}\, b_2]|2\Omega - 2j\rangle = 0$$

$$(b_1^+b_1 + b_2^+b_2)(2\Omega - 2j) = (2\Omega - 2j)|2\Omega - 2j\rangle$$

很显然，相应于不同子群链，$|\varphi_{n_1n_2}\rangle$与$|\varphi_{jm}\rangle$由不同量子数标志，这些量子数的意义和取值都不同，以它们为基矢系所绘出的距阵表示不属于同一类.

要给出相应于一个子群链的 CSCO，必须先知道动力群生成元的实现方式和代数结构. 动力群生成元可以有不同的生成方式，但它们有相同的代数结构. 因此，只要把 CSCO 中的$\{A_\mu\}$换成$\{A'_\mu\}$，就得另一种 CSCO. 同理，它们的共同本征态也是一样，

$$|\varphi_{n_1n_2}\rangle = \varphi_{n_1n_2}(A_\mu)|\ \rangle \leftrightarrow |\varphi'_{n_1n_2}\rangle = \varphi_{n_1n_2}(A'_\mu)|\ \rangle'$$

$$|\varphi_{jm}\rangle = \varphi_{jm}(A_\mu)|\ \rangle \leftrightarrow |\varphi'_{jm}\rangle = \varphi_{jm}(A'_\mu)|\ \rangle'$$

故相应于同一子群链的量子正则表示，存在着自然的对应关系. 相反，不属于同一子群链的 CSCO 的正交基矢，

$$|\varphi_{n_1n_2}\rangle \not\leftrightarrow |\varphi_{jm}\rangle$$

不存在自然的对应关系. 必须引入外加条件，才能建立这两个正交基矢之间的一一对应关系.

基于上述性质，我们把同一类的量子正则表示间的变换定义为**量子正则变换**. 它不同于一般的么正变换，在那里必须引入外加条件，才能建立两正交基矢系间的一一对应关系，不能把二者混同起来[9].

现在进一步讨论量子正则变换所特有的性质. 因为对应于某个状态$|\Psi\rangle$而言，

$$|\Psi\rangle = \sum_m C_m|\psi_m\rangle, \qquad \sum_m |C_m|^2 = 1$$

$$|\Psi\rangle = \sum_m C'_m|\psi'_m\rangle, \qquad \sum_m |C'_m|^2 = 1$$

既可把变换看作标架的变换，也可看作坐标的变换，

$$f:\ |\psi_m\rangle \to |\psi'_m\rangle \qquad f^{-1}:\ \{C_m\} \to \{C'_m\}$$

还可以在同一标架中考虑，把$\{C_m\}$和$\{C'_m\}$看作$|\psi\rangle$和$|\psi'\rangle$的坐标，

$$f^{-1}:\quad |\psi\rangle \to |\psi'\rangle$$

如果$\{C_m\}$在单位球表面上作微小变动，则

$$f^{-1}:\ g^{-1}|\psi\rangle \to f^{-1}g^{-1}|\psi\rangle = (g')^{-1}|\psi'\rangle,$$

$$g(g^+ = g^{-1}) \in G$$

$$(g')^{-1} = f^{-1}g^{-1}f$$

因为 $f$ 是量子正则变换，$g'$ 也是一个群元，由$\{A'_\mu\}$表述，

$$g'(g'^+ = g'^{-1}) \in G$$

相应于$|\psi\rangle$的微小变动，$|\psi'\rangle$也只作微小变动. 量子正则变换**对初条件的微小改变是稳定的**. 因此 $\underset{\sim}{C}$ 与 $\underset{\sim}{C}'$ 间的关系应表为**可微泛函**

$$\underset{\sim}{C}' = f^{-1}[\underset{\sim}{C}], \qquad \underset{\sim}{C} = f[\underset{\sim}{C}']$$

## 3　关于规则运动的条件及其被破坏的可能

像经典规则运动一样，量子规则运动要求存在一组完备的随 $t$ 连续变化的运动积分，故状态随时间的演化能表为量子正则变换. 这里的状态指任意的状态，由于状态叠加原理，也就是指整个正交基矢系. 量子正则变换所表达的是整个正交基矢系或整个状态空间的性质.

一切正交基矢的演化都能表为量子正则变换时，相干态波包的各个成分才能协同地变化，才能继续保持相干态波包的特征，才能在经典极限下过渡到相点的稳定轨迹.

总之，**规则运动的充要条件是状态的演化可表为可微泛函**

$$|\Psi(t)\rangle = f[t, |\Psi(t=0)\rangle]$$

但人们会问，薛定谔方程不同于哈密顿方程，它是一个线性偏微分方程，它的解会给出规则运

动条件被破坏的情形吗?

第一,这里所讲的是整个状态空间的性质.当某两个正交基矢演化的情况截然不同于其它正交基矢时,有关的相干态波包的各成分就不能协同变化,就不能继续保持相干态波包的特征,表现出它的不稳定性.

第二,薛定谔方程虽是线性的,但在有限时间阶段后的解,一般不再是线性的,虽上述泛函必须满足状态叠加原理要求,将$|\Psi(0)\rangle$,$|\Psi(t)\rangle$换成$\lambda|\Psi(t)\rangle$,$\lambda|\Psi(t)\rangle$,上述泛函表示式仍应成立,但式中却可以含投影算子

$$|\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)|/\langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle$$

等.这种泛函表示式是极端复杂的.我们能求得的实际上是下述表示式

$$F[t,|\Psi(0)\rangle,|\Psi(t)\rangle]=0$$

必须从**隐函数(隐泛函)存在定理**去讨论状态的演化能否表为可微泛函的问题.

明确了这两点,则薛定谔方程解给出规则运动条件被破坏的情形就不足为怪了.

## 4　量子混沌的实现与量子混沌的特征

在前面几节中我们着重讨论量子规则运动的条件及其可能的破坏.在讨论过程中解答了几个曾令人困惑的问题.在此基础上就可以讨论量子混沌的实现与量子混沌的特征.在这里我们仅扼要指出:

(1)状态空间典型结构特征的破坏,有一个从局部破坏到大范围破坏的发展过程;

(2)量子混沌的实现,就是状态空间的一切可能有的典型结构特征的丧失;

(3)量子混沌的特征是极端复杂性,用粗粒化方法来考察其平均值和涨落时,就呈现出涨落的"随机性"和"自相似性";

(4)"随机性"和"自相似性"是决定论性混沌所共有的性质,但量子混沌所要求的条件是

$$1\ll \Delta N\ll M$$

而经典混沌则是$\dfrac{M}{\Delta N},\dfrac{\Delta N}{1}\to\infty$时的理想情形.

## 参　考　文　献


1　Xu Gongou, et al. Phys. Rev., 1992, A45: 5401

2　Kramers H A.　Quantum Mechanics (North Holland Publishing Co. Amsterdam, 1957, P. 155)

3　Dirrac P A M.　The Priciples of Quantum Mechanics, 4th ed. (Clarendon, Oxford, 1958) § 14

4　Wigner E P.　Phys. Rev., 1932, 40: 749

5　Moyal J E.　Proc. Camb. Phil. Soc., 1949, 45: 99

6　Chen J Q.　Group Representation Theory for Physists (World Scientific, Singapore, 1988)

7　Roman P.　Advanced Quantum Theory (Addison－Wesley, Reading, 1965, P. 33)


# Puzzles in Studies of Quantum Chaos


Xu Gongou

(*Department of Physics, Nanjing University,　Nanjing*　21008)



**Abstract**　Puzzles in studies of quantum chaos are discussed. From the view of global properties of quantum states, it is clarified that quantum chaos originates from the break-down of invariant properties of quantum canonical transformations. There exist precise correspondences between quantum and classical chaos.



**Key Words**　quantum chaos,　global property of states,　canonical transformation, quantum-classical correspondence.