



ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

34

Б. В. Чириков

**ПРИМЕР ХАОТИЧЕСКИХ СТАЦИОНАРНЫХ
СОСТОЯНИЙ СЛОЖНОГО АТОМА**

ПРЕПРИНТ 85-56



НОВОСИБИРСК

ПРИМЕР ХАОТИЧЕСКИХ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ
СЛОЖНОГО АТОМА

Б.В. Чириков

Институт ядерной физики СО АН СССР

А Н Н О Т А Ц И Я

Статистический анализ группы возбужденных состояний атома церия с полным моментом и четностью $J^\pi = 1^+$ показывает, что их волновые функции представляют собой случайную суперпозицию некоторых базисных состояний. Кратко обсуждается возможный динамический механизм образования таких состояний.

To appear in Phys. Lett. A

Движение многих динамических систем классической механики является хаотическим, или стохастическим (см., например, /1/). К их числу относится и многоэлектронный (сильно возбужденный) атом, на что указывает, в частности, большая вероятность его автоионизации (эффект Оже) вследствие быстрого обмена энергией между электронами. Последнее связано, в свою очередь, с отсутствием в атоме малого параметра возмущения (в отличие от похожей на него в классике Солнечной системы), а также с сингулярностью кулоновского взаимодействия.

В квантовой механике, однако, динамический временной хаос невозможен из-за дискретности спектра энергий. Требуемый принципом соответствия переход к классическому хаосу осуществляется в этом случае на некотором диффузионном масштабе времени /2/ (см. также /3/) $T_d \sim D^{-1} = \rho$, где ρ - средняя плотность уровней в окрестности определенной энергетической поверхности ($\hbar = 1$). На этом масштабе система еще "не чувствует" (по соотношению неопределенности) дискретности спектра и диффундирует по энергетической поверхности как и в классическом пределе. Точнее, диффузия происходит по инвариантной поверхности, заданной всеми точными интегралами движения, к которым, кроме энергии E , относятся, в рассматриваемом случае, также полный момент J и четность. Кроме того, разрешенная область движения на инвариантной поверхности существенно ограничена, вообще говоря, принципом Паули. Для краткости мы будем говорить ниже просто об энергетической поверхности. Отметим, что классическая диффузия в квантовой системе на масштабе T_d возможна лишь при дополнительном условии превышения квантовой границы устойчивости /4/. Последнее означает, что возмущение существенно смешивает различные невозмущенные состояния.

Поскольку масштаб T_d быстро увеличивается с ростом квантовых чисел I , то при достаточно больших I система (ее функция Вигнера - аналог классической функции распределения в фазовом пространстве) успевает релаксировать к микроканоническому распределению для почти любого начального состояния. Иначе говоря, такая квантовая система становится эргодической. С точки зрения квантовой динамики это, однако, возможно только в том случае, когда почти все собственные функции Вигнера сами являются эргодическими (см. (1) ниже). При $I \rightarrow \infty$ последнее строго доказано Шнирельманом /5/ для некоторой специальной ди-

намической системы бильярдного типа. Однако доказательство допускает, повидимому, обобщение и на значительно более широкий класс квантовых систем (см. /6/). Существенно, что для квантовой эргодичности требуется только эргодичность движения в классическом пределе /5/. Если же классическое движение обладает и более сильными статистическими свойствами (в частности, экспоненциальным убыванием корреляций), то естественно ожидать, что при $I \rightarrow \infty$ собственные функции соответствующей квантовой системы будут не просто эргодическими, а станут некоторыми гауссовскими случайными функциями. Насколько мне известно, впервые подобная гипотеза была фактически сформулирована в /7/ вне связи с динамическим хаосом в классическом пределе; эта связь обсуждалась в /8/ (см. также /3,9/).

Для достаточно больших, но конечных I эту гипотезу можно более конкретно сформулировать следующим образом. Рассмотрим ансамбль собственных функций ψ_m с определенными значениями всех точных интегралов движения кроме энергии и представим ψ_m в некотором базисе невозмущенных функций φ_n :

$$\psi_m = a_{mn} \varphi_n; \quad \varphi_n = \psi_m a_{mn} \quad (1)$$

Тогда элементы действительной ортогональной матрицы a_{mn} являются случайными величинами, распределенными по закону Гаусса с параметрами:

$$\langle a_{mn} \rangle = 0; \quad \sigma^2(a_{mn}) = \langle a_{mn}^2 \rangle - \langle a_{mn} \rangle^2 = \frac{1}{N} \quad (2)$$

Здесь $N(E)$ — размерность собственных функций в гильбертовом пространстве, т.е. эффективное число базисных состояний на энергетической поверхности (точнее, в некотором энергетическом слое, который соответствует энергетической поверхности в классическом пределе). Такие стационарные состояния будем называть хаотическими. Заметим, что при $N \rightarrow \infty$ статистическое описание применимо не только к ансамблю стационарных состояний (одной системы), но и почти к каждому отдельному стационарному состоянию. Это соответствует случайности почти любой индивидуальной траектории хаотического движения в классическом пределе.

Можно показать (см. например, /10/), что "гиббсовская" мера (2) для a_{mn} эквивалентна "микроканонической" мере на поверх-

ности единичной сферы в гильбертовом подпространстве N измерений, т.е. изотропному распределению собственных ψ -векторов в этом подпространстве. Именно так выбирается мера в статистической теории случайных матриц /10/.

Намеченный выше динамический подход позволяет, в принципе, выяснить условия применимости этой теории и найти важную характеристику собственных функций $N(E)$, которая отсутствует в статистической теории. Помимо этого, статистическое описание распространяется не только на ансамбль стационарных состояний одной системы, но даже и на отдельное состояние при $N \rightarrow \infty$ (ср. /11/).

Элементы a_{mn} не могут быть, конечно, полностью независимыми из-за условий нормировки и ортогональности ψ_m . Для $N \gg 1$ первое, очевидно, несущественно, а второе также оказывается сильно ослабленным, так как при $\langle a_{mn} \rangle = 0$ два любых независимых случайных вектора $\psi_m, \psi_{m'}$ "почти ортогональны": $a_{mn} a_{m'n'} \sim N^{-1/2} \rightarrow 0; N \rightarrow \infty$. Отсюда, в частности, следует, что неустраняемые корреляции a_{mn} малы, например /10/:

$$C(a_{mn}^2, a_{m'n'}^2) \approx -\frac{1}{N}; \quad C(a_{mn}^2, a_{m'n'}) \approx \frac{1}{N^2}$$

и в первом приближении ими можно пренебречь.

Хаотические стационарные состояния определяют предельно возможный для замкнутых систем квантовый хаос, который оказывается, таким образом, чисто пространственным. Временная же эволюция такой системы остается почти периодической. Иначе можно сказать, что случайная пространственная структура стационарных состояний отражает "застывший" хаос классического процесса перемешивания, дошедшего до своего предела — элементарной квантовой ячейки фазового пространства. По этой причине изложенную выше гипотезу можно назвать гипотезой максимального квантового хаоса (МКХ).

Квантовые числа основного и низколежащих возбужденных состояний даже в самых тяжелых атомах относительно невелики. Поэтому можно ожидать, что, в целом, электронные состояния в атомах являются промежуточными и характеризуются неполной эргодичностью, или, иначе, локализацией собственных функций на энергетической поверхности. Последние данные по статистическому анали-

зу распределения уровней в атомах редкоземельных элементов /12/ подтверждают этот вывод. Насколько мне известно, статистический анализ атомных состояний ограничивался до сих пор только значениями их энергий. Между тем, огромный экспериментальный материал, накопленный к настоящему времени и удачно собранный в атласе /13/, позволяет проанализировать также и непосредственно собственные функции редкоземельных элементов.

Ниже рассматривается один из примеров хаотических стационарных состояний сложного атома. В качестве такого примера выбрана группа из 35 возбужденных состояний нейтрального атома церия с $J^\pi = 1^+$ (четные) в интервале $E \approx 2+3$ эВ над основным состоянием $J^\pi = 4^-$ (потенциал ионизации CeI равен 5.54 эВ). Среднее расстояние между уровнями энергии $D = 0.027$ эВ и остается постоянным в этом интервале в пределах статистической точности. Из 35 расшифровано 31 состояние, т.е. для них известны собственные функции. Эти данные не являются экспериментальными в буквальном смысле, а получаются путем приближенных вычислений с подгонкой по значениям энергии и гиромагнитного отношения группы состояний. Поскольку, однако, техника таких расчетов хорошо развита и имеется многолетний опыт ее успешного применения к расшифровке атомных состояний, можно принять, что данные о волновых функциях стационарных состояний являются достаточно надежными. Отметим, однако, что верхняя граница рассматриваемой группы состояний определяется как раз трудностями их расшифровки.

В атласе /13/ для каждого из расшифрованных состояний приведены по два главных базисных состояния, имеющих наибольшие вероятности в суперпозиции: $a_1^2 = w_1 \geq w_2 = a_2^2$. Всего зарегистрировано $n_T = 34$ базисных состояния, подавляющая часть которых (32) соответствует трем электронным конфигурациям:

$$4f5d6s6p; 4f^25d6s; 4f5d^26p$$

(главная (84%) конфигурация основного состояния $4f5d6s^2$).

На основе гипотезы МКХ (2) можно показать, что при $N \gg 1$ распределение для w является приближенно гауссовским с параметрами:

$$\langle w_1 \rangle \approx \frac{\ln N}{N}; \quad \langle w_2 \rangle \approx \frac{\ln N - 1}{N}; \quad \sigma(w_1) \approx \sigma(w_2) \approx \frac{1}{N} \quad (3)$$

Из данных /13/ находим: $\langle w_1 \rangle = 0.177$; $\langle w_2 \rangle = 0.111$, откуда $N^{(1)} = 15.4 \pm 1.6$. Здесь и ниже указаны среднеквадратичные разбросы ожидаемых распределений. Наименьшая ошибка в определении получается при использовании $\langle w_1 \rangle$. Из $\langle w_2 \rangle$ находим аналогично: $N^{(2)} = 16.0 \pm 3.8$, что хорошо согласуется с $N^{(1)}$. Нормированные дисперсия и четвертый момент распределения равны для w_1 :

$$m_2 \equiv (\sigma N^{(1)})^2 = 1.14 \pm 0.25$$

$$m_4 \equiv \frac{\langle (w_1 - \langle w_1 \rangle)^4 \rangle}{3\sigma^4} = 1.36 \pm 1.0 \quad (4)$$

что подтверждает гауссовский характер флуктуаций. Однако для w_2 соответствие гораздо хуже: $m_2 = 0.24$. Это объясняется, повидимому, недостаточно хорошим приближением гауссовского распределения для w_2 .

Диаграмма распределения главных базисных состояний по стационарным состояниям представлена на рис. I. Здесь m - номер стационарного состояния в порядке возрастания его энергии, а n - номер базисных состояний, упорядоченных по среднему m тех стационарных состояний, в которых встречается данное базисное состояние. Рис. I представляет, очевидно, структуру матрицы a_{mn} в (1). Характерной особенностью этой структуры является наличие более или менее четко ограниченной полосы, или слоя, отмеченного пунктирными прямыми, в пределах которого сосредоточены основные матричные элементы a_{mn} . Ширина слоя по n близка к приведенному выше значению $N \approx 15$, что можно рассматривать как независимое подтверждение такой размерности собственных функций. Подчеркнем, что при построении распределения на рис. I вероятности w никак не используются. Однако при упорядочении тех базисных состояний, которые попали только в одноstationарное состояние, происходит искусственная концентрация их около оси слоя. Если бы, например, все главные базисные состояния встречались только один раз, то после упорядочения они оказались бы на одной прямой. Поэтому для статистической обработки данных на рис. I такие одиночные базисные состояния (заштрихованы) необходимо исключить. Распределение оставшихся состояний вдоль слоя (по n), т.е. фактически по энергетической поверхности хорошо согласуется с равномерным распределением: $\chi^2(4) = 2.1$ (доверительная вероятность $\sim 30\%$). Средняя дисперсия базисных состояний $\sigma_n^2 = 19.6$, откуда эффективное число состояний на энерге-

тической поверхности $N_E = \sqrt{12} \bar{\sigma}_n = 15.3 \pm 1.2$. Совпадение этого значения с $N^{(1)}$ из ω_1 , которое непосредственно характеризует среднее число базисных состояний, связанных собственными функциями, свидетельствует об эргодичности последних.

Распределение базисных состояний поперек слоя (по m) также хорошо согласуется с равномерным: $\chi^2(4) = 5.1$ (~30%). Дисперсия базисного состояния $\bar{\sigma}_m^2 = 17.4$, откуда среднее число собственных функций, представляющих одно базисное состояние, или "толщина" энергетического слоя $\Delta E/D = N_\varphi = 14.4 \pm 1.1$. Равенство $N_\varphi = N_E$ вследствие нормировки волновых функций (см. (2)) является дополнительной проверкой полученных результатов.

Были проведены и другие проверки, подтвердившие гипотезу МКХ в рассматриваемом примере. В частности, распределение числа собственных функций, в которых определенное базисное состояние является главным, согласуется с биномиальным с параметром $p = 2/N$. Отсюда можно также найти число пропущенных на рис. I (и в /13/) базисных состояний, которое равно 4.5 ± 2 .

Относительно небольшое значение размерности N атомных собственных функции позволяет исследовать их глобальную структуру (рис. I) и ясно указывает на ограниченную применимость статистической теории случайных матриц. В последней размер матрицы ($d \times d$) является произвольным параметром, причем обычно принимается, что $d \rightarrow \infty$ /10/, тогда как на самом деле должно быть $d \ll N(E)$. Отметим, что в отличие от атомов последнее неравенство всегда выполняется в тяжелых атомных ядрах, где $N \sim 10^6$ /14/, которые и являются идеальным объектом теории случайных матриц. Качественное отличие в возбуждении атомов и ядер было подчеркнуто Н. Бором уже в его первой работе по составному ядру /15/. Сегодня это различие представляется скорее количественным, чем качественным, но все же оно очень велико.

Пользуюсь случаем выразить искреннюю признательность В.Г. Зелевинскому, О.П. Сушкову, В.В. Фламбауму, И.Б. Хрипловичу и А.И. Шнирельману за интересные обсуждения.

1. А.Лихтенберг, М.Либерман. Регулярная и стохастическая динамика. М.: Мир, 1984.
2. B.V.Chirikov, F.M.Izrailev, D.L.Shepelyansky. Sov. Sci. Reviews 2C (1981) 209.
3. Б.В.Чириков. УФН 139 (1983) 360.
4. Э.В.Шуряк. ЖЭТФ 71 (1976) 2039.
5. А.И.Шнирельман. УМН 29:6 (1974) 181.
6. A.Voros. Lecture Notes in Physics 93 (1979) 326.
7. C.E.Porter, R.G.Thomas. Phys. Rev. 104 (1956) 483.
8. M.V.Berry. J. Phys. A10 (1977) 2083.
9. G.M.Zaslavsky, Phys. Reports 80 (1981) 157.
10. T.A.Brody et al. Rev. Mod. Phys. 53 (1981) 385.
11. M.Shapiro and G.Goelman, Phys. Rev. Lett. 53 (1984) 1714.
12. H.S.Camarda and P.D.Georgopoulos, Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 492.
13. W.C.Martin, R.Zalubas and L.Hagan, Atomic Energy Levels: The Rare-Earth Elements (NBS, Washington, 1978).
14. A.Bohr and B.R.Mottelson, Nuclear Structure (Benjamin, New York, 1969).
15. N.Bohr, Nature 137 (1936) 344.

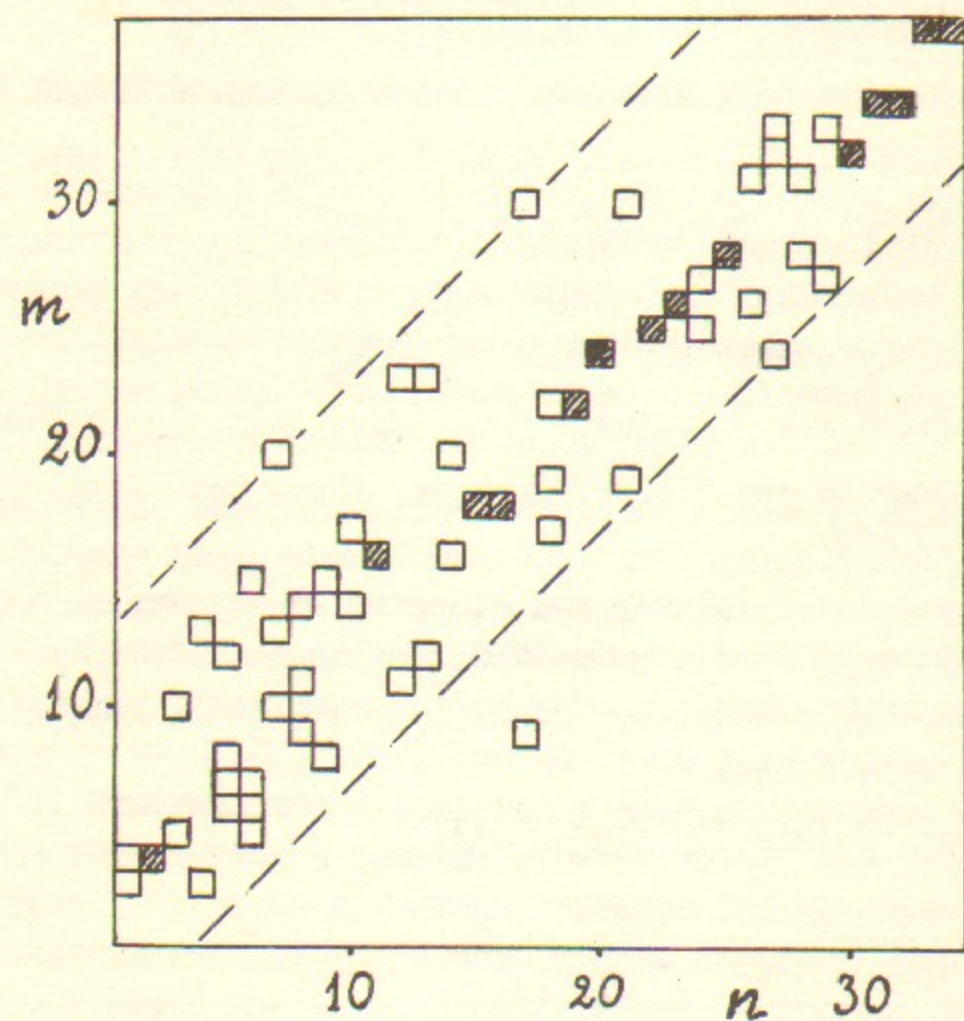


Рис.1. Глобальная структура атомных стационарных состояний ψ_m , представленная распределением главных базисных состояний φ_n (см. текст).

Б.В.Чириков

ПРИМЕР ХАОТИЧЕСКИХ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ
СЛОЖНОГО АТОМА

Препринт
№ 85-56

Работа поступила - 15 апреля 1985 г.

Ответственный за выпуск - С.Г.Попов

Подписано к печати 30.04.85г. МН 06655

Формат бумаги 60x90 1/16 Усл.С,8 печ.л., 0,7 учетно-изд.л.

Тираж 290 экз. Бесплатно. Заказ №56

Ротапринт ИЯФ СО АН СССР, г.Новосибирск, 90