1997年9月 重庆大学学报 (自然科学版) Vol. 20, №: 5
第20卷第5期 Journal of Chongqing University (Natural Science Edition) Sep. 1997

(13)

98-72

评判紧邻间距分布函数性质的一类渐近尺度*

O412

An Asymptotic Criterion to Qualitfies of Nearest-Neighbor Spacing Distribution Functions

陶长元[1] 王斌[1] 刘信安[1] 罗久里[2]
Tao Changyuan Wang Bin Liu Xinan Luo Jiuli
(① 重庆大学化学化工学院,重庆,400044; ② 四川大学化学系; 第一作者34岁,男,副教授,博士)

摘 要 根据两种渐近量的定义,研究了七种能谱涨落模型之紧邻间距分布函数的渐近性质及其物理内涵,并在此基础上对紧邻间距分布函数作出了系统分类和适用性说明。研究结果表明Brody分布函数具有最为广泛的普适性。

关键词 能谱涨落统计; 紧邻间距分布; 渐近尺度 分布函数

中国图书资料分类法分类号 O411.2

ABSTRACT By determining two kinds of asymptotic quantities (δ, φ), the quantities and their physical meanings of NNS distributions of seven energy level fluctuation models are studied. Based on these, systematic classification and illustration of applicability are carried on the NNS distribution functions in this paper. The research result indicates that Brody distribution function has most extensive universality.

KEYWORDS statistics of energy spectral fluctuations; nearest-neighbor spacing distribution; asymptotic criterion

0 引 言

能谱涨落序之紧邻间距分布(Nearest-neighbor Spacing Distribution)$P(s)$(简称NNS分布),是能谱涨落统计分析研究中的重要特征量度之一。$P(s)$即是能谱涨落序中紧邻能级间距为S的出现概率,它表征着谱的细标度结构。随机矩阵及量子理论[1,2]和实验[3,4]都已证明:当哈密顿体系在完全规则(可积)的极限情形下,其能谱涨落序之NNS分布为Poisson型

$$P(s) = (1/D)\exp(-s/D) \tag{1}$$

而在完全不规则(混沌)的极限情形下,其NNS分布为Wigner型

$$P(s) = (\pi s/2D^2)\exp(-\pi s^2/4D^2) \tag{2}$$

式中,D为平均紧邻间距。从而,对于具有时间反转不变性的量子守恒系统,其能谱涨落序之

* 收文日期 1997-01-21

NNS 分布联系着该系统的不可积性及其动力学行为，因此 NNS 分布已成为探索量子混沌现象的一种静态测度指标。

然而，大量的量子体系是上述两极限情形的"混合共存"。已有证据表明[6]，无一谱适的能谱涨落模型能完美统一地描述这类一般体系之 NNS 分布，事实上这也表明了物理体系的内在固有的复杂性特征。因而人们从不同角度出发，引出了多种能谱涨落模型[6]，以试图概括各种过渡情形的 NNS 分布。这些模型实际上都是上述两种极限情形的"内插"，它们与实际能谱的符合程度，主要取决于模型本身的特性。

不难理解，由于从规则通向混沌之途径的多样化，自然导致能谱涨落模型及其 NNS 分布函数的多样化，但这使人们在分析某一具体能谱涨落序之 NNS 分布时面临模型选择的巨大困难。目前在能谱涨落统计分析研究中，还无法在理论上对某一具体能谱归属何种谱涨落模型作出有说服力的阐明，一般都是选择某一谱涨落模型为基准，而确定具体能谱涨落序之 NNS 分布。本文即是作者对这一问题的探索性研究，通过两种渐近量的引入和各种 NNS 分布函数之渐近性质的比较与研究，试图在唯象上抽取出评价各种 NNS 分布函数（或说谱涨落模型）的适用性准绳。

1　能谱涨落模型概要

在众多的过渡型能谱涨落模型中，以下五种最具理论意义和代表性：

1.1　Brody 模型[7,8]

其 NNS 分布函数为

$$P_B(s) = \beta(\alpha + 1)s^{\alpha}\exp(-\beta s^{\alpha+1}) \tag{3}$$

其中

$$\beta = \left[D^{-1}\Gamma\left(\frac{\alpha+2}{\alpha+1}\right)\right]^{\alpha+1}$$

式中，α 称为能级斥力参数。当 $\alpha = 0$ 和 1 时，(3) 式分别蜕变为 Poisson 和 Wigner 分布函数。

1.2　Berry-Robnik 模型[9]

Berry 和 Robnik 假设谱系由两分立的子序迭加而成，其一服从 Poisson 统计，另一服从 Wigner 统计，而两子序的相对权重为 $(1-q)$ 和 q，即分别是占满规则和混沌轨迹的相空间区域之刘维测度。这样，最后推得的 NNS 分布函数为

$$P_{BR}(s) = e^{(q-1)s}\left[(1-q)^2\mathrm{erfc}\left(\frac{\sqrt{\pi}}{2}qs\right) + \left(2q(1-q) + \frac{\pi}{2}q^3 s\right)\exp\left(-\frac{\pi}{4}q^2 s^2\right)\right] \tag{4}$$

其中余误差函数 $\mathrm{erfc}(z)$ 的定义为

$$\mathrm{erfc}(z) = 1 - \mathrm{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_z^{\infty} e^{-u^2}du$$

(4) 式在 $q = 0$ 和 1 时分别变为 Poisson 和 Wigner 分布函数。

1.3　Hasegawa 模型[10,11]

该模型是对能谱运动方程采用随机微分方程描述而得来的，其 NNS 分布函数依赖于参数 λ 和 α

$$P_{Ha}(s) = N\rho s(\rho^2 s^2 e^{2\rho s} + \lambda^2 e^{\alpha^2\rho^2 s^2})^{-1/2} \tag{5}$$

其中 $\rho = F_2/F_1$；

$N = \rho/F_1$；

$$F_a = \int_0^\infty x^a (x^a e^{2x} + \lambda^2 e^{\alpha^2} x^2)^{-1/2} \mathrm{d}x$$

该模型的基本思想是：在体系中存在着两类噪音，其一对应于能级簇（能级聚集的趋势、无斥力），另一对应于能级斥力，参数 λ 为这两噪音的相对强度，而联系着噪音的平均能级密度之比率由 α 控制。在 $\alpha = 0$ 和 ∞ 时，(5) 式分别变为 Poisson 和 Wigner 分布函数。

1.4 Robnik 模型[6]

Robnik 在分布之二阶矩 $\langle s^2 \rangle = \int s^2 P(s) \mathrm{d}s$ 的附加约束下，从最大熵原理出发，提出了该能谱涨落模型，其 NNS 分布函数为

$$P_R(s) = s e^{-\lambda - us - \nu s^2} \tag{6}$$

其中，λ、u、ν 均为待定系数。

1.5 Hōnig 模型[6]

Hōnig 等人定义能级斥力 r 与 s 的关系为

$$r(s) \sim s(s^2 + q^2)^{-1/2} \tag{7}$$

从而推得如下形式的 NNS 分布函数

$$P_{HO}(s) = [Ns/(s^2 + q^2)^{1/2}] \exp[-\alpha(s^2 + q^2)^{1/2}] \tag{8}$$

式中，N 和 α 由归一化条件确定。在 $q = 0$ 和 ∞ 时 (8) 式分别变为 Poisson 和 Wigner 分布函数。

对如上五种 NNS 分布函数，人们在实测及理论计算的能谱涨落统计分析中总结发现：Brody 分布函数的实际应用最为广泛，Berry-Robnik 分布函数仅找到了个别的理论计算谱系与其相符，而 Hōnig、Robnik 和 Hasegawa 分布函数至今还未发现有很好符合的谱系存在。

2 NNS 分布函数的渐近性质与分类

上述五种NNS分布函数都是Poisson和Wigner分布函数间的“内插”或“组合”，但由于各自的出发点不同，从而导致它们在实际能谱涨落统计分析中适用程度的差异。然而，令人惊奇的是，从核谱、原子光谱到分子光谱，从实验能谱至理论计算的本征能谱，Brody 分布函数都表现出极高的普适性。为深刻认识上述 NNS 分布函数在具体能谱涨落统计分析中表现出的适用性上的差别，展示和比较这些 NNS 分布函数间的 差别是基本而重要的研究内容。而研究的可能手法之一就是寻找这些 NNS 分布函数所共有、并能展示相互间差异的某些特征量。

考虑到在 $S \to 0$ 时，量子系与对应的经典动力学系统的联系逐渐显式化，为此，首先提出第一种渐近量定义，即

$$\delta = \lim_{s \to 0} \frac{\ln P(s)}{\ln s} \tag{9}$$

针对上述五种过渡型NNS分布函数和 Poisson、Wigner分布函数，其 δ 值的具体计算结果见附表．由 δ 的计算结果，可自然地将这些NNS分布函数分为三类：1) Poisson、Berry-Robnik 分布函数；2) Brody 分布函数；3) Hasegawa、Hōnig、Robnik、Wigner 分布函数。

附表　NNS 分布函数的 δ 和 φ 值及分类

NNS 分布函数名称	δ	φ	分类
Poisson	0	∞	①
Berry-Robnik	0	∞	
Brody	a	∞	②
Hasegawa	1	Ne/λ	③
Robnik	1	$e^{-\lambda}$	
Hönig	1	$\frac{N}{q}e^{-\alpha q}$	
Wigner	1	$\pi/2D^2$	④

由于 Berry Robnik、Hasegawa、Robnik、Hönig 分布函数是 Poisson 和 Wigner 分布函数间的“内插”，从而由 δ 值无法将它们与极限情形之 NNS 分布函数的性质差异区分出来。进一步注意到第三类 NNS 分布函数表达式中，其指数前因子中都含有 S 项，为此我们进一步引入如下第二种渐近量，即

$$\varphi = \lim_{s\to 0}\frac{P(s)}{s} \tag{10}$$

同样，针对上述 NNS 分布函数，其 φ 的具体结果见附表。显然，由于内插的缘故，Hasegawa、Robnik、Hönig 分布函数的 φ 值应在 $\left[\frac{\pi}{2D^2},\infty\right]$ 之中。

这样，由上述两种渐近量 δ 和 φ 的结果，我们可将所讨论的七种 NNS 分布函数分为四类，见附表。

3　δ 和 φ 的物理内涵

能谱涨落序是一类分形客体，这已被 Cederbaum 等人[12] 和我们[13] 的研究工作所证实。将分维的 Kolmogrov 容量维 D_0 定义式

$$D_0 = \lim_{\xi\to 0}\frac{\ln N(\xi)}{\ln(1/\xi)} \tag{11}$$

与渐近量 δ 定义(9)式相比较，可知它们具有相似的数学形式，这意味着渐近量 δ 表征着能谱涨落序的某种标度不变性质，从而也就清楚地说明 NNS 分布确实表征着谱的细标度结构；同时也表明渐近量 δ 对表征 NNS 分布函数具有重要价值，不同能谱涨落模型之 NNS 分布函数在 δ 值上的差别，将能显著地反映出模型之间本质上的差异。由附表可知，对于 Brody 分布函数，其 δ 值在[0,1]区间中任意取值，即能完整地展示 NNS 分布从 Poisson 至 Wigner 型的演化；而 Berry-Robnik、Hasegawa、Robnik、Hönig 分布函数的 δ 值都不是在[0,1]区间中取值。从 δ 来看，Berry-Robnik 分布函数等价于 Poisson 分布函数，而 Hasegawa、Robnik、Hönig 分布函数等价于 Wigner 分布函数，因此，渐近量 δ 从唯象上表明了上述四种分布函数在 Poisson 和 Wigner 分布函数间内插的不完备性，而 Brody 分布函数对描述 NNS 分布从 Poisson 至 Wigner 型的演化具有最为广泛的普适性。

在 Brody 分布函数(3)式中，能级斥力参数 a 表征能级间的相互排斥能力，由附表可知有 $\delta = a$，这就进一步说明渐近量 δ 亦表征能级间的排斥度。由此，我们亦不难分析得出：在 $s\to$

0 时，Berry-Robnik 分布函数实质上没有包含能级斥力情形，而 Hasegawa、Robnik、Hönig 分布函数又没有包含无或低能级斥力的情形，从而它们也就自然地在具体能谱涨落统计分析中缺乏普适性了。

渐近量 φ 是表征谱细标度结构或说能级间斥力以外的一种内在特征量，由附表结果看出，其取值应在 $\left[\frac{\pi}{2D^2},\infty\right]$ 区间内，联系着能谱涨落序的整体性质量，如归一化因子、平均紧邻间距等。由于 NNS 分布表征谱细标度结构，比之于能级斥力值，整体性质量对 NNS 分布的影响较小，因此相对于渐近量 δ 而言，渐近量 φ 对于反映这些 NNS 分布函数间差别的重要性较小。

由 φ 值清楚地表明：虽然 Brody 分布函数具有最为广泛的普适性，但由于其 φ 值为 ∞，与 Poisson 分布函数之值相同，这就证实仍有不能以此来很好描述的能谱涨落序存在。Hasegawa 和 Robnik 分布函数的 φ 值实际为一定值，Hönig 分布函数的 φ 值随 q 在 $[\infty,0]$ 区间变化，从而再次表明都缺乏普适性。

至此，通过两种渐近量的引入和分析，以唯象的手法对五种过渡型 NNS 分布函数在能谱涨落统计分析中的适用性作出了较为详细、符合实际总结的探索性研究，这对能谱涨落统计分析工作具有指导性价值。然而，对如何从能谱涨落模型本身出发，研究其适用性，势必涉及通向混沌的途径问题，则属于进一步研究的范畴。

参 考 文 献

1 Mehta M L. Random Matrices and the Statistical Theory of Energy Level. Academic N Y; 1965. 1～87

2 Eckhard B. Quantum Mechanics of Classically Non-integrable System. Phys. Rep. , 1988, 163. 205～297

3 Brody T A. Random-matrix Physics; spectrum and Strength Fluctuations. Rev. Mod. Phys. , 1981, 53; 385

4 Camarda H S. Statistical Behavior of Atomic Energy Levels; Agreement with Random-Matrix Theory. Phys. Rev. Lett. , 1983, 50; 492～495

5 Robnik M. A note on the level spacings distribution of the hamiltonians in the transition region between integrability and chaos. J. Phys. A, 1987, 20; L495～L502

6 Hönig A, Wintgen D. Spectral Properties of Strongly Perturbed Coulomb Systems; Fluctuation Properties. Phys. Rev. A, 1989, 39(11); 5642～5657

7 Brody T A. A Statistical Measure for the Repulsion of Energy Levels. Lett. Nuovc. Cimento, 1973, (7); 482～484

8 陶长元，罗久里，鄢国森．Brody 型能谱邻间距分布的确定．化学物理学报，1993，2(6)；148～155

9 Berry M V, Robnik M. Semiclassical Level Spacings when Regular and Chaotic Orbits Coexist. J. Phys. A, 1984, 17; 2413～2421

10 Hasegawa H. Stochastic Formulation of Energy-level Statistics. Phys. Rev. A, 1988, 38; 395～399

11 陶长元，罗久里．能谱涨落统计的动力学理论．化学研究与应用，1995，(4)；351～357

12 Cederbaum L S. Fractal Dimension Function for Energy Levels. Phys. Rev. A, 1985, 31; 1869～1871

13 陶长元，罗久里．能谱分维函数与邻间距 NNS 分布．化学研究与应用，1991，(1)；46～51