

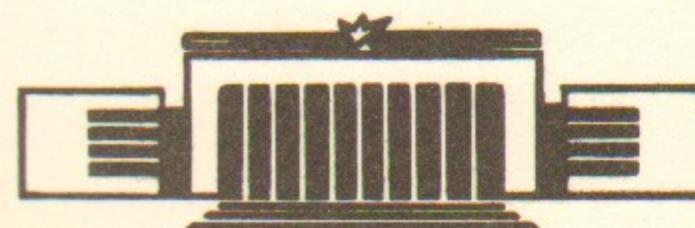


ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

П.Н.Исаев

СТАТИСТИЧЕСКИЕ И КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ
СВОЙСТВА ОПЕРАТОРОВ
В ПОДВИЖНОМ БАЗИСЕ

ПРЕПРИНТ 83-95



НОВОСИБИРСК

СТАТИСТИЧЕСКИЕ И КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ОПЕРАТОРОВ В ПОД-
ВИЖНОМ БАЗИСЕ

П.Н.Исаев

А Н Н О Т А Ц И Я

Рассмотрены статистические и корреляционные свойства интегралов перекрытия $\langle \phi_i(q) | \phi_j(q') \rangle$ и матриц искажения $\langle \phi_i(q) | \frac{q}{2q} | \phi_j(q') \rangle$ в подвижном базисе, зависящем от переменной как от параметра среднего поля. Получена аналитическая формула затухания корреляций и определена зависимость масштаба затухания от энергии возбуждения. Учтено смешивание конфигураций за счет остаточного взаимодействия и определена форма и масштаб затухания корреляций.

Л и т е р а т у р а

1. Nemes M.C., Weidenmüller H. *Phys. Rev.* C24 (1981) 450.
2. Nemes M.C., Weidenmüller H. *Phys. Rev.* C24 (1981) 944.
3. Mukamel S., Smilansky U., Gross D.H.E., e.a. *Nucl. Phys.* A366 (1981) 339.
4. Gross D.H.E., Möhring K., Mukamel S., e.a. *Nucl. Phys.* A378 (1982) 375.
5. Ayik S., Nörenberg W. *Z. Phys.* A280 (1978) 401, *ibid* A279 (1980) 55.
6. Agassi D., Ko C.M., Weidenmüller H. *Ann. of Phys.* 107 (1977) 140, *ibid* 177 (1979) 237, *ibid* 177 (1979) 407.
7. Hill D.L., Wheeler J.A. *Phys. Rev.* 89 (1953) 1102.
8. Бор.О., Моттельсон Б. Структура атомного ядра. - М.: Мир, 1977, т. I.

І. В в е д е н і е

Кинетическое описание реакций глубоконеупругих передач (ГНП) с тяжелыми ионами в приближении сильной связи составляет предмет интенсивного обсуждения в последние несколько лет /1-4/. Главной чертой этого приближения по сравнению с традиционными подходами /5,6/ является попытка точного учета эффектов исследования внутренних состояний двойной системы (ДС) путем подвижного базиса, локально диагонализирующего внутренний гамильтониан. В этом представлении диссипативные процессы обусловлены переходами за счет неадиабатических поправок (уравнение для статистического оператора в подвижном базисе явно содержит скорость глобального движения).

Как и в традиционных подходах /5,6/, конструктивным элементом расчетов в приближении сильной связи является модель случайных матриц: при данной конфигурации q матричные элементы операторов по высоколежащим возбужденным состояниям содержат случайные фазы, быстро меняющиеся при изменении квантовых чисел в интервалах (ячейках), соответствующих данной энергии возбуждения. Поэтому следует учитывать только когерентные суммы комбинаций случайных матричных элементов, вводя для этой цели парные свертки /5,6/. Трудности возникают при рассмотрении корреляций матриц операторов, заданных в различных конфигурациях q и q' . Обычно, как и в транспортной теории, затухание корреляций аппроксимируется гауссовой зависимостью от $q-q'$ /1/ с некоторым масштабом затухания, для которого приводятся малоубедительные качественные оценки. Кроме того, пренебрегается зависимостью масштаба затухания от энергии возбуждения, которая существенна для обоснования марковского предела в кинетическом уравнении для описания промежуточной стадии релаксационного процесса.

Целью настоящей работы является рассмотрение корреляционных свойств операторов в подвижном базисе. Мы аналитически получим форму затухания парных корреляций, масштаб затухания и его зависимость от энергии возбуждения. В разделе 2 мы рассмотрим корреляционные свойства операторов в базисе модели независимых частиц, движущихся в зависящем от глобальных координат q среднем поле. В разделе 3 развит аппарат модели случайных матриц в виде, пригодным для исследования корреляционных

свойств коэффициентов разложения сложных состояний по базисным наборам, построенным на различных конфигурациях. В разделе 4 исследуются статистические и корреляционные свойства сложных состояний и матриц искажения в подвижном базисе. Краткое обсуждение наших результатов и сравнение с другими работами приведено в Заключении.

2. Корреляции операторов в модели независимых частиц.

Для описания ядерной кинетики ДС на промежуточной стадии мы постулируем форму внутреннего гамильтониана.

$$H(q, \xi) = H_0(q, \xi) + V(\xi) \quad (1)$$

содержащего одночастичное слагаемое (невзаимодействующие частицы в среднем поле, зависящем от q)

$$H_0(q, \xi) = \sum_{\lambda} \varepsilon_{\lambda}(q) a_{\lambda}^+(q) a_{\lambda}(q) \quad (2)$$

и оператор $V(\xi)$ двухчастичного взаимодействия, не зависящего явно (для простоты) от глобальных координат^{*}. Фермиевские операторы $a_{\lambda}(q)$ и $a_{\lambda}^+(q)$ зависят от q

$$\frac{\partial}{\partial q} a_{\lambda}^+(q) = \sum_{\lambda'} a_{\lambda'}^+(q) \nabla_{\lambda \lambda'}(q), \quad \frac{\partial}{\partial q} a_{\lambda}(q) = - \sum_{\lambda'} \nabla_{\lambda \lambda'}(q) a_{\lambda'}(q) \quad (3)$$

где

$$\nabla_{\lambda \lambda'}(q) = \langle \psi_{\lambda}(q) | \frac{\partial}{\partial q} | \psi_{\lambda'}(q) \rangle = - \frac{1}{\varepsilon_{\lambda}(q) - \varepsilon_{\lambda'}(q)} \left(\frac{\partial h}{\partial q} \right)_{\lambda \lambda'} \quad (4)$$

одночастичная матрица искажения собственных волновых функций $\psi_{\lambda}(q)$ ($h(q) \psi_{\lambda}(q) = \varepsilon_{\lambda}(q) \psi_{\lambda}(q)$). Кроме того

$$\{a_{\lambda}(q_1), a_{\lambda'}^+(q_2)\} = \Delta_{\lambda \lambda'}(q_1, q_2) = \langle \psi_{\lambda}(q_1) | \psi_{\lambda'}(q_2) \rangle \quad (5)$$

^{*} В разделе 4 мы уточним это предположение: достаточно, чтобы парные свертки взаимодействия мало менялись на масштабе искажения базисных состояний (см. ниже).

$$\{a_{\lambda}(q_1), a_{\lambda'}^+(q_2)\} = \{a_{\lambda}^+(q_1), a_{\lambda'}^+(q_2)\} = 0 \quad (6)$$

где $\Delta_{\lambda \lambda'}(q_1, q_2)$ – интегралы перекрытия одночастичных базисных состояний.

В отсутствие взаимодействия V собственные функции $\phi_i(q)$ оператора $H_0(q)$ задаются набором $\{i_1, i_2, \dots, i_N\}$ квантовых чисел занятых одночастичных состояний.

$$\Phi_i(q) = a_{i_1}^+(q) a_{i_2}^+(q) \dots a_{i_N}^+(q) |0\rangle \quad (7)$$

Многочастичных интеграл перекрытия двух состояний $\phi_i(q_1)$ и $\phi_j(q_2)$ с одинаковыми наборами $\{i\}$ занятых уровней равен

$$\langle \phi_i(q_1) | \phi_j(q_2) \rangle = \det \| \Delta_{i_1, i_2}(q_1, q_2) \| = \exp(S_p \ln \Delta(q_1, q_2)) \quad (8)$$

Используя разложение по разности $q_2 - q_1 = \omega$ до квадратичных членов

$$\Delta(q_1, q_2) = 1 + \omega \nabla(q_1) + \frac{\omega^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial q} \nabla(q_1) + \nabla^2(q_1) \right) \quad (9)$$

находим

$$\langle \phi_i(q_1) | \phi_j(q_2) \rangle = \exp \left(- \frac{\omega^2}{2\sigma_i^2} \right) \quad (10)$$

$$\frac{1}{\sigma_i^2} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda \lambda'} \left(\frac{n_{\lambda}^{(i)} - n_{\lambda'}^{(i)}}{\varepsilon_{\lambda} - \varepsilon_{\lambda'}} \right)^2 \left| \left(\frac{\partial h}{\partial q} \right)_{\lambda \lambda'} \right|^2$$

где $n_{\lambda}^{(i)}$ – числа заполнения одночастичных состояний в слэтеровском детерминанте $\phi_i(q)$. Скорость затухания корреляций (10) зависит от квантовых чисел многочастичного состояния. Руководствуясь идеями модели случайных матриц, усредним $1/\sigma_i^2$ (II) по всем состояниям $\Phi_i(q)$ в окрестности энергии возбуждения $E_i \approx E$ (микроканонический ансамбль) и заменим это среднее на термодинамическое среднее по каноническому ансамблю при температуре T , определяемой соответствующей энергией возбуждения $E^* = E - E_0(q)$. В результате получим формулу, совпадающую с формулой (II), где под n_{λ} следует понимать фермиевскую температурную функцию распределения.

Для оценки $\sigma^2(E)$ заменим в сумме (10) квадрат матричного элемента $|(\partial\lambda(q)/\partial q)_{\lambda\lambda'}|^2$ характерным значением f^2 , определенным на интервале характерных частот переходов $d \leq |\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}| \leq \omega_{max}$. Если выполнено условие $d \ll T \ll \omega_{max}$, такая замена справедлива, а подавление слагаемых с $|\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}| < d$ можно моделировать заменой $(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'})^2 \rightarrow (\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'})^2 / [(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'})^2 + d^2]^2$ (эта процедура аналогична определению интеграла в смысле главного значения). В результате находим^{*)}

$$\frac{1}{\sigma^2(E)} = f^2 v_0^2 \frac{\pi T}{2d} \quad (12)$$

где v_0 — плотность состояний на поверхности Ферми. Поскольку в среднем поле сложной конфигурации матричные элементы оператора $\partial\lambda(q)/\partial q$ практически не ограничены правилами отбора, в качестве d можно взять величину v_0^{-1} — расстояние между одночастичными уровнями, и ввести величину $\sigma_0^{-2} = v_0^2 f^2$, определяющую масштаб искажения одночастичных уровней на фермиповерхности. В результате находим следующее соотношение между одночастичным σ_0^{-2} и многочастичным $\sigma^2(E)$ масштабами искажения волновых функций

$$\frac{1}{\sigma^2(E)} = \frac{1}{\sigma_0^{-2}} \frac{\pi v_F T}{2} = \frac{1}{\sigma_0^{-2}} \frac{3\pi A}{4} \frac{T}{\varepsilon_F} \quad (13)$$

где учтено $v_F = \frac{3A}{2\varepsilon_F}$ — суммарная плотность одночастичных протонных и нейтронных состояний на поверхности Ферми. В силу исходных предположений в области малых энергий возбуждения формула (13) неприменима: это происходит при $T \leq d$, когда нельзя пренебречь дискретностью одночастичного спектра на интервале порядка температуры. В этом случае прямой расчет при $T = 0$ дает

$$\left(\frac{1}{\sigma^2}\right)_{T=0} = \frac{1}{\sigma_0^{-2}} 2 \ln\left(\frac{v_F \omega_{max}}{4}\right) = \frac{2}{\sigma_0^{-2}} \ln\left(\frac{3A \omega_{max}}{8\varepsilon_F}\right) \quad (14)$$

где мы пренебрегаем изменением плотности уровней на интервале

^{*)} Отметим, что ответ слабо зависит от способа "регуляризации" знаменателя $= d^2 n^2$, $n = 1, 2, \dots$. При другом способе, заменяя $(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'})^2 =$ $= d^2 n^2$, коэффициент $\pi/2$ в (12) следует заменить величиной $\pi^2/10$.

частот переходов $|\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}| < \omega_{max}$ через поверхность Ферми^{*)}. В отличие от (13) зависимость от A получилась логарифмической. Если взять для оценки значения параметров $A = 200$, $\varepsilon_F = 37$ МэВ, $T = 2$ МэВ, $\omega_{max} = 10$ МэВ, то для значений коэффициентов в (13) и (14) находим соответственно 25.5 и 6.0, что свидетельствует о довольно плавной зависимости $\sigma^2(E)$ от энергии возбуждения на характерном для ГНП интервале потерь. Соотношение между корреляционными масштабами при этом меняется от 2.5 до 5, т.е. приблизительно в 2 раза.

Отметим, что учет только квадратичных членов в показателе экспоненты (10) оправдан. Действительно, дифференцирование состояний типа (7) по q эквивалентно действию одночастичного оператора

$$\hat{D}(q) = \sum_{\lambda\lambda'} \nabla_{\lambda\lambda'}(q) \alpha_\lambda^\dagger(q) \alpha_{\lambda'}(q) \quad (15)$$

Поэтому справедливо равенство

$$\phi_i(q+x) = e^{\chi \hat{D}(q)} \phi_i(q) \quad (16)$$

Этакуда для среднего значения по каноническому ансамблю получаем

$$\overline{\langle \phi_i(q) | \phi_i(q+x) \rangle} = \langle e^{\chi \hat{D}(q)} \rangle = e^{\frac{\chi^2}{2} \langle \hat{D}^2(q) \rangle} \quad (17)$$

что согласуется с (12), а следующие поправки в показателе экспоненты будут также пропорциональны A . Следовательно параметром разложения является отношение χ^2/σ_0^{-2} , и на интервале $\chi \leq \sigma_0$ формула (17) правильно описывает характер затухания корреляций.

Используя представление (16), нетрудно исследовать характер поведения недиагональных интегралов перекрытия $\langle \phi_i(q) | \phi_j(q) \rangle$. Если состояние $\phi_j(q)$ отличается от $\phi_i(q)$ изменением состояния одной частицы

^{*)} Логарифмическая зависимость от A (вместо линейной при $T \neq 0$) обусловлена более сильным действием принципа Паули: в сумме (10) по одночастичным уровням допустимы переходы только через поверхность Ферми. В этом пункте наш результат аналогичен рассмотренному в работе /7/.

$$\Phi_j(q) = \alpha_\mu^+(q) \alpha_\nu(q) \Phi_i(q) \quad (18)$$

то для интеграла перекрытия имеем ($\eta_{\lambda\mu} = \propto \nabla_{\lambda\mu}(q)$)

$$\overline{\langle \Phi_i(q) | \Phi_j(q+x) \rangle} = \frac{\delta}{\delta \eta_{\lambda\mu}} \overline{\langle \Phi_i(q) | \Phi_i(q+x) \rangle} = \propto \nabla_{\mu\lambda} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_i^2}} \quad (19)$$

и для характерного значения $|\langle \Phi_i(q) | \Phi_j(q+x) \rangle|^2$ имеем оценку

$$|\langle \Phi_i(q) | \Phi_j(q+x) \rangle|^2 \leq \frac{x^2}{\sigma_i^2} e^{-\frac{x^2}{\sigma_i^2}} \quad (20)$$

В частности, характерное значение многочастичной матрицы искажения $\nabla_{ij}(q) = \langle \Phi_i(q) | \frac{\partial}{\partial q} | \Phi_j(q) \rangle$ определяется одночастичной матрицей $\nabla_{\lambda\lambda}(q)$. Аналогичным образом можно построить интегралы перекрытия между многочастичными волновыми функциями, отличающимися изменением состояний нескольких частиц.

В заключение раздела отметим полезное тождество, получающееся из разложения левой и правой части формулы (10) по степеням

$$\sum_j |\nabla_{ij}(q)|^2 = \frac{1}{\sigma_i^2} \quad (21)$$

Этот результат допускает естественную интерпретацию. В левой части стоит сумма по j величин $(\frac{\partial H_0}{\partial q})_{ij} / (E_i - E_j)^2$, которая набирается на интервале $|E_i - E_j| \approx d$ — среднее расстояние между одночастичными уровнями. Фактор усиления $\pi v_F T / 2$ в (12) дает эффективное число близких частично-дырочных пар в состоянии $\Phi_i(q)$, возбуждаемых действием на него одночастичного оператора $\partial H_0(q) / \partial q$. При низких температурах $T \ll E_F$ это число ограничено принципом запрета Паули. В классическом пределе его действие исчезает и фактор усиления равен полному числу частиц в системе.

3. Смешивание конфигураций в модели случайных матриц.

В этом разделе мы учтем эффекты смешивания простых состояний за счет остаточного взаимодействия. Мы будем опираться на представления модели случайных матриц, аппроксимирующей случайность фаз матричных элементов взаимодействия по состояниям, содержащим большое число квазичастич: допускается, что усреднение физических величин по большому числу состояний вблизи данной энергии можно заменить усреднением по ансамблю матриц возмущения $V_{ij}(q) = \langle \Phi_i(q) | V | \Phi_j(q) \rangle$ со случайными фазами и определенными следующими статистическими свойствами

$$\langle V_{ij}(q) \rangle = 0, \quad \langle V_{ij}(q) V_{kl}(q) \rangle \equiv \overline{V_{ij}(q) V_{kl}(q)} = \delta_{jk} \delta_{il} \overline{|V_{ij}(q)|^2} \quad (22)$$

Усреднение по ансамблю произведения четного числа случайных матриц распадается на всевозможные парные свертки. Введение парных сверток (22) позволяет эффективным образом выделять коherентные суммы в произведениях большого числа матриц.

Смешивание конфигураций приводит к тому, что при достаточно больших энергиях возбуждения точное состояние $\psi_\mu(q)$ гамильтониана (1) разлагается по большому числу простых состояний

$$\psi_\mu(q) = \sum_i c_{\mu i}(q) \phi_i(q), \quad H(q) \psi_\mu(q) = E_\mu(q) \psi_\mu(q) \quad (23)$$

В этом разделе мы ограничимся рассмотрением статистических свойств коэффициентов $c_{\mu i}(q)$ в фиксированном базисном наборе $\Phi_i(q)$, поэтому в дальнейшем будем опускать в обозначениях глобальную переменную q . Корреляционные свойства коэффициентов $c_{\mu i}(q)$ при различных базисных наборах будут рассмотрены в следующем разделе. Идеология и необходимые для этого уравнения будут получены ниже.

Очевидно, что в силу случайности фаз матричных элементов возмущения усреднение $\langle c_{\mu i} \rangle$ в узком интервале энергий E_i даст нулевой результат и имеет смысл говорить только о среднем квадрате $\langle |c_{\mu i}|^2 \rangle$. Последний удобно связать с мнимой частью функции Грина

$$G(E) = (E - H + i\gamma)^{-1}, \quad \gamma \rightarrow 0 \quad (24)$$

выражением

$$\langle |C_{pi}|^2 \rangle = \frac{1}{\rho(E)} P_i(E) = - \frac{1}{\pi \rho(E)} \langle \Im G_{ii}(E) \rangle \quad (25)$$

где $P_i(E)$ – силовая функция простого состояния ϕ_i , вычисленная при значении аргумента $E = E_i$. Для усредненной функции Грина $\langle G(E) \rangle$ можно получить уравнение, аналогичное уравнению для оптической функции Грина в транспортной теории /6/. Представим $G(E)$ в виде ряда по степеням V , усреднение которого следует проводить только с учетом комбинаций парных сверток без пересечения линий (свертки с пересечением дают малость $\sim 1/N$, где N – эффективное число отличных от нуля недиагональных матричных элементов $|V_{ij}|^2$ с фиксированным одним из индексов). В результате получаем

$$\begin{aligned} \langle G \rangle &= G^0 + G^0 \overline{VG^0} V G^0 + G^0 \overline{VG^0} V G^0 \overline{VG^0} V G^0 + G^0 \overline{VG^0} \overline{VG^0} \overline{VG^0} V G^0 + \dots = \\ &= G^0 + G^0 \overline{VG} V G \end{aligned} \quad (26)$$

где обозначено $G^0(E) = (E - H_0 + i\gamma)^{-1}$ и явно выписаны все слагаемые усредненного ряда до четвертого порядка по V . Усредненная функция Грина $\langle G_{ik}(E) \rangle$ явно диагональна и в замкнутой форме уравнение (26) записывается в виде ($\langle G_{ii}(E) \rangle \equiv \bar{G}_i(E)$)

$$\bar{G}_i(E) = G_i^0(E) + G_i^0(E) \sum_k \overline{|V_{ik}|^2} \bar{G}_k(E) \bar{G}_i(E) \quad (27)$$

Отметим, что в зависимости от величины параметра

$$\delta = \frac{V^2}{D \Delta \omega} \quad (28)$$

где V^2 – характерное значение свертки $\overline{|V_{ik}|^2}$, принимаемое на интервале $\Delta \omega$ частот переходов $\omega_{ik} = E_i - E_k$, $D = \rho^{-1}(E)$ среднее расстояние между уровнями, возможно два режима поведения $\bar{G}_i(E)$, а, следовательно и формы силовой функции (25). В пределе $\delta \ll 1$ можно ожидать, что сумма по k в (27) набирается на интервале частот $|\omega_{ik}| \ll \Delta \omega$ и свертку $\overline{|V_{ik}|^2}$ можно вынести из под знака суммы. В результате получим выражение ($S_p \bar{G}(E) = -i\pi \rho(E)$)

$$\bar{G}_i(E) = \left(E - E_i + i \frac{\Gamma^4}{2} \right)^{-1}, \quad \Gamma^4 = \frac{2\pi V^2}{D} \quad (29)$$

воспроизводящее брейт-вигнеровскую форму силовой функции /8/

$$\langle |C_{pi}|^2 \rangle = \frac{\Gamma^4 D / (2\pi)}{(E_i - E_i)^2 + (\Gamma^4/2)^2} \quad (30)$$

Исходное предположение выполнено в силу того, что $\Gamma^4 / \Delta \omega = 2\pi\delta \ll 1$. В обратном предельном случае $\delta \gg 1$ в (27) следует вынести из-под знака суммы функцию Грина $\bar{G}_k(E)$ при $k = i$. Решение квадратного уравнения дает

$$\bar{G}_i(E) = 2 / (E - E_i + \sqrt{(E - E_i)^2 - \gamma^2}), \quad \gamma^2 = 4 \sum_k \overline{|V_{ik}|^2} \quad (31)$$

что соответствует следующему выражению для второго момента $\langle |C_{pi}|^2 \rangle$

$$\langle |C_{pi}|^2 \rangle = \frac{2D}{\pi\gamma} \sqrt{1 - \Omega^2} \theta(1 - |\Omega|), \quad \Omega = \frac{E_i - E_i}{\gamma} \quad (32)$$

и согласуется с неравенством $\delta \gg 1$ ($\gamma^2 = V^2 \frac{\Delta \omega}{D} = \delta \Delta \omega^2 \gg \Delta \omega^2$). Форма (32) дает резкое обрезание силовой функции $P_i(E)$ и правильно описывает ее высшие моменты, связанные со средним значением гамильтонiana

$$\overline{\langle \Phi_i | (H_0 + V)^m | \Phi_i \rangle} = \int dE P_i(E) E^m \quad (33)$$

если в силу неравенства $\delta \gg I$ в левой части (33) не делать различия между свертками $\bar{V}H_0V$ и $\bar{V}VH_0$.

Если принять в качестве Γ^+ типичное значение $\Gamma^+ \approx 10 \text{ МэВ}/I-6/$, то в силу короткодействия двухчастичного взаимодействия $\Delta\omega \sim \varepsilon_F \gg \Gamma^+$ и мы находимся в режиме $\delta \ll I$. Поэтому в дальнейшем для $\bar{G}_i(E)$ будет использоваться формула (29).

С целью использования в следующем разделе рассмотрим другой способ вывода второго момента (30) коэффициентов разложения путем прямого решения системы уравнений

$$(E_p - E_i) c_{pi} = \sum_{j \neq i} V_{ij} c_{pj} \quad (34)$$

Выделим главную компоненту c_p , "выжившую" в пределе $V \rightarrow 0$ и будем считать ее строго положительной. Свобода такого выбора связана с произвольностью общей фазы волновой функции

ψ_p : случайными являются относительные фазы различных коэффициентов c_{pi} . Разрешим систему (34) относительно c_{pi} при $i \neq p$ и решение представим в виде

$$c_{pi} = \sum_j G_{ij}^{(n)} V_{ji} c_p \quad (35)$$

Здесь обозначено

$$G_{ij}^{(n)} = (E_p - H^{(n)})^{-1}_{ij} \quad (36)$$

где $H^{(n)}$ — матрица, построенная из матрицы гамильтониана $E \delta_{ij} + V_{ij}$ "вычеркиванием" n -го столбца и строки. Аналитически продолжим функцию (36) по переменной $E_p = E$ в верхнюю полуплоскость, определив ее как запаздывающую функцию Грина с гамильтонианом $H^{(n)}$

$$G^{(n)}(E) = (E - H^{(n)} + i\eta)^{-1} \quad (37)$$

На вещественной оси в точках $E = E_p$, не совпадающих с собственными значениями "урезанного" гамильтониана $H^{(n)}$ функция Грина $G^{(n)}(E)$ переходит в матрицу $G_{ij}^{(n)}$ (36). В том же

духе коэффициент c_{pi} (35) будем рассматривать как функцию комплексной энергии $E_p = E$ на всех промежуточных выкладках и лишь на последнем этапе положим E равным истинному значению энеэнергии уровня.

Далее, определим матрицу плотности

$$\rho_{ij} = \langle c_{pi} c_{pj}^* \rangle = \sum_{kk'} \langle G_{ik}^{(n)}(E_p) V_{kp} c_p c_{k'} V_{k'j} G_{j k'}^{(n)}(E_p) \rangle \quad (38)$$

как функцию комплексных переменных E_p и E_p , усредненную по ансамблю случайных матриц. Учитывая, что $G_{ij}^{(n)}$ по определению не содержит матричных элементов типа $G_{ij}^{(n)} V_{im}$ или V_{pi} находим

$$\rho_{ij} = \delta_{pv} \sum_k \langle G_{ik}^{(n)}(E_p) \overline{V_{kp} c_p^2 V_{pk}} G_{jk}^{(n)}(E_p) \rangle \quad (39)$$

где одинаковые аргументы в функциях Грина означают, что в конечном результате их следует устремить к одному пределу. Ортогональность свертки (38) при $i \neq j$ вытекает непосредственно из определения (22). Оставшаяся свертка $\langle GG \rangle$ вычисляется разложением функций Грина в ряд по V и учетом комбинаций сверток без пересечения. В результате для матрицы плотности ρ_{ik} получаем уравнение (множитель δ_{pv} опускаем, полагая $p = v$)

$$\begin{aligned} \rho_{ij} = & \delta_{ij} \left\{ \bar{G}_i^{(n)}(E_p) \overline{V_{ip} c_p^2 V_{pi}} \bar{G}_i^{(n)}(E_p) + \right. \\ & \left. + \sum_{k \neq i} \bar{G}_i^{(n)}(E_p) \overline{V_{ik} \rho_{kk} V_{ki}} \bar{G}_i^{(n)}(E_p) \right\} \end{aligned} \quad (40)$$

откуда явно следует диагональность по индексам i, j . Величина $\bar{G}_i^{(n)}(E) = \langle G_{ii}^{(n)}(E) \rangle$ удовлетворяет уравнению (27) и в тех же предположениях может быть представлена выражением

$$\bar{G}_i^{(n)}(E) = (E - E_i + \frac{\Gamma^+}{2})^{-1} \quad (41)$$

где изменением спредовой ширины Γ^{\downarrow} за счет отличия усеченного гамильтониана $H^{(4)}$ от полного H очевидно можно пренебречь. Вынося из-под знака суммы по k в (40) свертку $|V_{ik}|^2 \approx V^2$ и учитывая, что в силу нормировки $\sum_{k \neq \mu} p_{kk} = 1 - c_{\mu}^2$ получаем выражение

$$\langle c_{\mu i} | c_{\nu j}^* \rangle = \delta_{\mu\nu} \delta_{ij} \frac{V^2}{(E_i - E_j)^2 + (\Gamma^{\downarrow}/2)^2} \quad (42)$$

справедливое также при $i = \mu$ и совпадающее с (30).

Построенный формализм особенно удобно использовать для расчета корреляций коэффициентов разложения $c_{\mu i}$, построенных на сдвинутых друг относительно друга конфигурациях q и q' , которые будут рассмотрены в следующем разделе.

4. Корреляционные свойства в подвижном базисе.

В первую очередь определим корреляционные свойства возмущения $V_{ij}(q) = \langle \Phi_i(q) | V | \Phi_j(q) \rangle$ как парную свертку матриц, построенных на различных конфигурациях q и $q' = q + \omega$. Имея в виду отсутствие явной зависимости оператора $V(5)$ от глобальной координаты (или допуская такую зависимость на масштабе Δq , значительно превышающем масштаб σ искажения базисных функций), находим

$$\overline{V_{ij}(q)} V_{ke}(q') = \langle \Phi_k(q) | \Phi_j(q) \rangle \langle \Phi_i(q) | \Phi_e(q') \rangle \overline{|V_{ij}(q)|^2} \quad (43)$$

где аргумент в свертке $\overline{|V_{ij}(q)|^2}$ с точностью до $\sigma^2/(\Delta q)^2$ может быть заменен на q' . В дальнейшем для плавно меняющихся на масштабе Δq средних величин мы будем опускать различие между q и q' .

В духе результатов предыдущего раздела определим коэффициент разложения выражением, аналогичным (35) ($i \neq \mu$)

$$c_{\mu i}(q) = \sum_j G_{ij}^{(\mu)} V_{j\mu}(q) c \quad (44)$$

где $c^2 = \frac{2D}{\pi \Gamma^{\downarrow}}$ - "главный" коэффициент разложения. Построим матрицу плотности, усредненную с учетом (22) и (43)

$$\rho_{ij}^{(\mu\nu)}(x) = \langle c_{\mu i}(q) c_{\nu j}^*(q') \rangle = \sum_{kk'} \left\langle G_{ij}^{(\mu)}(q) V_{k\mu}(q) c^2 V_{k'\nu}(q') G_{j k'}^{(\nu)}(q') \right\rangle \quad (45)$$

Здесь по-прежнему следует учитывать только совместные свертки V , стоящих слева и справа от c^2 , и в результате получаем

$$\rho_{ij}^{(\mu\nu)}(x) = \langle \Phi_i(q') | \Phi_j(q) \rangle \sum_{kk'} \left\langle G_{ik}^{(\mu)}(q) V_{k\mu}(q) c^2 V_{k'\nu}(q) \langle \Phi_k(q) | \Phi_{k'}(q') \rangle G_{jk'}^{(\nu)}(q') \right\rangle \quad (46)$$

Вычисляя свертку $\langle G G \rangle$ по способу, рассмотренному в предыдущем разделе, находим уравнение для $\rho_{ij}^{(\mu\nu)}(x)$, аналогичное (40)

$$\begin{aligned} \rho_{ij}^{(\mu\nu)}(x) &= \langle \Phi_i(q) | \Phi_j(q') \rangle \overline{G_i^{(\mu)}(q)} V_{i\mu}(q) c^2 V_{j\mu}(q) \overline{G_j^{(\nu)}(q')} \langle \Phi_i(q') | \Phi_j(q) \rangle \\ &+ \sum_{\substack{k \neq \mu \\ k' \neq \nu}} \overline{G_i^{(\mu)}(q)} V_{ik}(q) \rho_{kk'}^{(\mu\nu)}(x) \langle \Phi_{k'}(q') | \Phi_k(q) \rangle V_{ki}(q) \langle \Phi_i(q) | \Phi_{k'}(q') \rangle \overline{G_{k'}^{(\nu)}(q')} \end{aligned} \quad (47)$$

где явно выделены свертки (22), определенные на фиксированной конфигурации q . Заменяя их характерным значением V^2 , решение уравнения (47) можно представить в виде

$$\rho_{ij}^{(\mu\nu)}(x) = \langle \Phi_i(q) | \Phi_j(q') \rangle \overline{G_i^{(\mu)}(q)} V^2 \overline{G_j^{(\nu)}(q')} \frac{1}{1 - S_{\mu\nu}(x)} c^2 \langle \Phi_i(q') | \Phi_j(q) \rangle \quad (48)$$

где

$$S_{\mu\nu}(x) = \sum_{\substack{i \neq \mu \\ j \neq \nu}} \overline{G_i^{(\mu)}(q)} V^2 \overline{G_j^{(\nu)}(q')} |\langle \Phi_i(q) | \Phi_j(q') \rangle|^2 \quad (49)$$

При $x = 0$, учитывая ортогональность $\langle \Phi_i(q) | \Phi_j(q') \rangle \rightarrow \delta_{ij}$ для суммы (49) при $\mu = \nu$ находим $S_{\mu\mu}(0) = 1 - c^2$, в результате чего формула (48) переходит в (42). При конечном x следует учесть, что на интересующем нас масштабе $\omega \ll \sigma$: скалярное произведение $|\langle \Phi_i(q) | \Phi_j(q') \rangle|^2$ отлично от нуля на

интервале ΔE частот $E_i - E_j$, малом по сравнению с Γ^{\downarrow} . Его можно оценить как эффективное число слагаемых, дающих вклад в сумму (21). Поскольку каждое слагаемое имеет порядок $1/\sigma_i^2$, сумма набирается на $N = \sigma_e^2/\sigma_i^2 = \pi v_F T/2$ членах, распределенных на интервале частот переходов, не превышающих $T \ll \Gamma^{\downarrow}$ ²⁾. По этой причине при $\mu = v$ индексы пропагаторов в сумме (49) можно считать одинаковыми и в результате получаем

$$S_{\mu\mu}(\infty) = \sum_{i \neq j} |G_i^{(v)}|^2 v^2 (1 - |\langle \Phi_i(q) | \Phi_j(q') \rangle|^2) = \\ = 1 - c^2 - c^2 (1 - |\langle \Phi_i(q) | \Phi_i(q') \rangle|^2) \quad (50)$$

Подставляя (50) в (48) получаем

$$\rho_{ij}^{\mu\mu}(\infty) = \frac{\Gamma^{\downarrow} D/(2\pi)}{(E_p - E_i)^2 + (\Gamma^{\downarrow}/2)^2} \frac{\langle \Phi_i(q) | \Phi_j(q') \rangle \langle \Phi_\mu(q') | \Phi_\mu(q) \rangle}{2 - |\langle \Phi_\mu(q') | \Phi_\mu(q) \rangle|^2} \quad (51)$$

Формула (51) при $\infty \rightarrow 0$ очевидно переходит в (42).

В том, что масштаб изменения суммы $S_{\mu\mu}(\infty)$ определяется величиной σ_i^2 , можно убедиться непосредственным разложением $S_{\mu\mu}(\infty)$ по степеням ∞ . Учитывая, что

$$|\langle \Phi_i(q) | \Phi_j(q') \rangle|^2 = \delta_{ij} \left(1 - \frac{\infty^2}{\sigma_i^2}\right) + \infty^2 |\nabla_{ij}|^2 + \dots \quad (52)$$

и используя (21), получаем

$$1 - S_{\mu\mu}(\infty) = c^2 \left(1 + \frac{\infty^2}{\sigma_i^2} + \dots\right)$$

Структура разложения указывает на то, что параметром, определяющим масштаб изменения $S_{\mu\mu}(\infty)$, является величина σ_i^2 .

Рассмотрим интеграл перекрытия двух сложных состояний (23)

²⁾ Точнее оценку ширину ΔE можно получить, зная "главную компоненту" $c_{\infty}^2 = |\langle \Phi_i(q) | \Phi_i(q') \rangle|^2$. Используя (30) или (32), имеем $\Delta E \sim D \exp(\infty^2/\sigma_i^2)$, откуда видно, что лишь при $\infty \sim \sigma_i (\ln \Gamma^{\downarrow}/D)^{1/2} \gg \sigma_i$ "спредовая" ширина за счет искажения становится сравнимой с Γ^{\downarrow} . Последнее условие ограничивает применимость дальнейшего рассмотрения.

$$\langle \psi_\mu(q') | \psi_\mu(q) \rangle = \sum_{ij} \langle c_{\mu i}(q) c_{\mu j}^*(q') \rangle \langle \phi_j(q') | \phi_i(q) \rangle \quad (53)$$

Используя (48) получаем

$$\langle \psi_\mu(q') | \psi_\mu(q) \rangle = \frac{\langle \Phi_\mu(q') | \Phi_\mu(q) \rangle}{2 - |\langle \Phi_\mu(q') | \Phi_\mu(q) \rangle|^2} = e^{-\frac{\infty^2}{2\sigma_\mu^2}} / \left(2 - e^{-\frac{\infty^2}{\sigma_\mu^2}}\right) \quad (54)$$

откуда видно, что масштаб затухания интеграла перекрытия (54) также определяется масштабом искажения базисных функций. Из формулы (54) можно получить соотношение для матрицы искажения $\nabla_{\mu\nu}(q) = \langle \psi_\mu(q) | \frac{\partial}{\partial q} | \psi_\nu(q) \rangle$ точных состояний, аналогичное (21): дважды дифференцируя по ∞ левую и правую часть (54) и полагая $\infty = 0$, находим

$$\sum_v |\nabla_{\mu\nu}(q)|^2 = \frac{3}{\sigma_\mu^2} \quad (55)$$

Наканец, рассмотрим коррелятор двух матриц искажения

$$\langle \nabla_{\mu\nu}(q) \nabla_{\mu\nu}^*(q') \rangle = \sum_{ijk\ell} \left\langle \left(c_{\mu i}^*(q) \frac{\partial}{\partial q} c_{\nu i}(q) \delta_{ij} + c_{\mu i}^*(q) \nabla_{ij}(q) c_{\nu j}(q) \right) \times \right. \\ \left. \times \left(c_{\mu k}^*(q') \frac{\partial}{\partial q'} c_{\nu k}^*(q') \delta_{\ell k} + c_{\mu k}^*(q') \nabla_{\ell k}(q') c_{\nu \ell}(q') \right) \right\rangle \quad (56)$$

Используя (51) для сверток коэффициентов, соответствующих различным конфигурациям q и q' (альтернативный способ свертки в силу условий диагональности (42) не дает вклада), можно показать, что дифференцирование в (51) сомножителя

$\langle \Phi_i(q) | \Phi_j(q') \rangle$ можно не учитывать: все четыре таких вклада в (56) в точности компенсируют друг друга. В остальных случаях основной вклад, не обращающийся в нуль при $\infty \rightarrow 0$ дается сверткой в (56), содержащей явно смешанную производную по q и q' . В результате находим

4. Заключение

Мы рассмотрели корреляционные свойства интегралов перекрытия и матриц искажения в подвижном базисе, зависящем от параметров, задающих форму среднего поля системы (например, двойной системы в реакциях ГНП). Масштаб искажения одночастичных волновых функций состояний вблизи поверхности Ферми обозначен σ_0 .

В модели независимых частиц затухание интегралов перекрытия характеризуется масштабом σ_i^2 значительно меньшим одночастичного масштаба σ_0^2 . Это уменьшение обусловлено многочастичностью волновой функции системы: искажение одночастичных волновых функций когерентно усиливается, что уменьшает масштаб искажения. Интегралы перекрытия затухают по гауссовому закону.

Обнаружена довольно слабая зависимость масштаба затухания от энергии состояния: $\sigma^2(E) \sim T^{-1}$. На интервале температур от нуля до 2 МэВ величина σ^2 уменьшается в несколько раз и приблизительно на порядок меньше σ_0^2 .

Учтены эффекты смешивания конфигураций остаточным взаимодействием. Для этой цели развит аппарат модели случайных матриц, удобный для использования в расчетах корреляционных свойств коэффициентов разложения сложных состояний по простым.

Показано, что масштаб затухания корреляций сложных состояний также определяется масштабом искажения σ_i^2 базисных функций. Это справедливо до тех пор, пока "спредовая" ширина, обусловленная искажением, $\Gamma_x \sim D e^{\frac{x^2}{\sigma_i^2}}$ становится сравнимой со спредовой шириной Γ^+ , порождаемой остаточными силами: $x^2 \approx \sigma_i^2 \ln\left(\frac{\Gamma^+}{D}\right) \gg \sigma_i^2$ в режиме сильного размешивания. В этом пункте наши результаты отличаются от результатов работы /I/, где на качественном уровне получена оценка $\sigma_0^2/\sigma_i^2 = 4 \cdot 10^4$. На наш взгляд причина столь сильного расхождения (почти на три порядка по оценкам в разделе 2) кроется в ошибочном определении в /I/ эффектов искажения точных волновых функций по степени изменения энергий базисных состояний. Действительно, мыслима такая форма гамильтониана $H_0(q)$, которая не искажает базисных функций $\Phi_i(q)$ и вместе с тем изменяет энергии базисных состояний (например, $H_0(q+x) = H_0(q) + x F(q)$, и $[H_0(q), F(q)] = 0$). Ясно, что в этом случае затухание интегра-

где учтена явная симметрия по индексам μ и ν . При $x = 0$ из формулы (57) получаем свертку матриц искажения

$$|\nabla_{\mu\nu}(q)|^2 = \frac{3}{2\sigma_{\mu\nu}^2} \frac{\Gamma^+ D / \pi}{(E_p - E_v)^2 + (\Gamma^+)^2} \quad (58)$$

Суммируя по одному из индексов с учетом слабой зависимости масштаба σ_i^2 от энергии E_p на интервале $\sim \Gamma^+$, получаем результат, совпадающий с формулой (55).

Отметим, что для дальнейшей работы достаточно ограничиться гауссовым фактором, стоящим в числителе формулы (57): именно он определяет масштаб затухания корреляций матриц искажения, а более высокие степени гауссовых факторов, возникающих от знаменателя, не меняют этого утверждения. Их важно было учесть только для определения величины парной свертки, связанной с производной интеграла перекрытия по x (53), т.е. скоростью затухания корреляций.

При $\mu \neq \nu$ в корреляторе $\rho_{ij}^{\mu\nu}(x)$ появляется малость за счет скалярного произведения $\langle \Phi_i(q) | \Phi_j(q') \rangle$, отличного от нуля на интервале $\Delta E \ll \Gamma^+$. При $x = 0$ это произведение обращается в нуль, а при $x \ll \sigma_0$ имеет дополнительную малость $(\sigma_0/\sigma_i)^k$, $k \geq 1$ (см.раздел 2). Поэтому такие свертки, а следовательно, и недиагональные корреляторы матриц можно не учитывать. Таким образом, для коррелятора (56) получаем окончательное выражение

$$\langle \nabla_{\mu\nu}(q) \nabla_{\lambda\sigma}^*(q') \rangle = \delta_{\mu\lambda} \delta_{\nu\sigma} \frac{3}{2\sigma_{\mu\nu}^2} \frac{\Gamma^+ D / \pi}{(E_p - E_v)^2 + (\Gamma^+)^2} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_{\mu\nu}^2}} \quad (59)$$

лов перекрытия и корреляций матриц искажения отсутствует. Последнее обусловлено собственным искажением базисных функций и порождается недиагональными матричными элементами $F_{ij}(q)$, $i \neq j$. Получим нашу оценку масштаба затухания интегралов перекрытия, используя рассуждения авторов работы /I/. Представим гамильтониан системы в измененной конфигурации $q' = q + \alpha$ матрицей, в базисе точных состояний $\psi_m(q) = \sum_i c_{mi} \phi_i(q)$

$$H_{\mu\nu}(q+\alpha) = E_\mu \delta_{\mu\nu} + \alpha F_{\mu\nu}$$

где $F_{\mu\nu} = \sum_j c_{\mu i}^* F_{ij} c_{\nu j}$. Характерное значение квадрата не-диагонального матричного элемента $\langle |F_{\mu\nu}|^2 \rangle$ определяется выражением

$$\langle |F_{\mu\nu}|^2 \rangle = \sum_j \langle |c_{\mu i}|^2 \rangle \langle |c_{\nu j}|^2 \rangle |F_{ij}|^2 \simeq \langle F^2 \rangle \frac{D}{\Gamma^4}$$

где $\langle F^2 \rangle$ - характерный квадрат матричного элемента F_{ij} в базисе простых состояний ϕ_i . В силу "многокомпонентности" разложения ψ_m по ϕ_i , величина $\langle |F_{\mu\nu}|^2 \rangle$ в Γ^4/D раз ослаблена по сравнению с $\langle F^2 \rangle$. Вклад α_ν отдельного состояния $\psi_m(q)$ в искаженную волновую функцию $\psi_m(q+\alpha)$ оценивается по теории возмущений как $|\alpha_\nu|^2 \simeq \langle |F_{\mu\nu}|^2 \rangle / D^2$, а эффективное число таких вкладов равно $\simeq \Gamma^4/D$. Поэтому искажение точного состояния становится существенным, когда

$$\alpha^2 \frac{\langle |F_{\mu\nu}|^2 \rangle}{D^2} \frac{\Gamma^4}{D} \simeq \alpha^2 \frac{\langle F^2 \rangle}{D^2} \simeq 1$$

Последнее условие в терминологии теории возмущений эквивалентно условию сильного искажения базисного набора $\phi_i(q)$. Отсюда вытекает приближенное равенство масштабов искажения базисных состояний и точных волновых функций.

Этот результат становится еще более очевидным, если принять предположение авторов /I/ о независимости матричных элементов $V_{ij}(q)$ от q ($V_{ij}(q) V_{ke}(q') = |V_{ij}|^2 \delta_{ik} \delta_{je}$ ^{*)}). В этом случае статистические свойства коэффициентов $c_{mi}(q)$ и

^{*)} Этому приближению в формуле (51) соответствует условие $q = q'$, т.к. по построению скалярные произведения $\langle \phi_i(q) | \phi_j(q') \rangle$, $\langle \phi_i(q') | \phi_j(q) \rangle$ появляются только из свертки (43).

$c_{mi}(q')$ идентичны и корреляция не затухает (раздел 4). Тогда скалярное произведение $\langle \psi_m(q) | \psi_m(q') \rangle = \sum_i |c_{mi}|^2 \langle \phi_i(q) | \phi_i(q') \rangle$ затухает на масштабе σ_r^{-2} и в силу соотношения, аналогичного (52), приводит к уже полученной оценке для свертки матриц искажения.

Конечно, основываясь на подобных рассуждениях нельзя определить структуру свертки матриц искажения, форму и масштабы затухания их корреляторов и интегралов перекрытия. Все это и составило предмет исследования настоящей работы. Мы определили аналитическую форму затухания корреляций и спектральные характеристики парной свертки матриц искажения. Отметим, что форма спектральной свертки совпадает с таковой из работы /I/.

Что же касается работ /3,4/, то в них вообще отсутствуют сколь-нибудь убедительные аналитические оценки масштабов корреляций, поэтому полученные в них результаты трудно обсуждать.

Автор благодарен В.Г.Зелевинскому и В.Б.Телицыну за активное обсуждение затронутых здесь вопросов и ценные замечания.

П.Н.Исаев

СТАТИСТИЧЕСКИЕ И КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ОПЕРАТОРОВ
В ПОДВИЖНОМ БАЗИСЕ

Препринт
№ 83- 95

Работа поступила 1 августа 1983г.

Ответственный за выпуск - С.Г.Попов

Подписано к печати 15.08.83г. № 03299

Формат бумаги 60x90 1/16 Усл.1,3 печ.л., 1,1 учетно-изд.л.

Тираж 290 экз. Бесплатно. Заказ № 95

Ротапринт ИЯФ СО АН СССР, г.Новосибирск, 90