1. Univerzalitási osztályok

Eddig nem tárgyaltuk az egyik lényeges szimmetria tulajdonságot, az időtükrözési szimmetriát. Az időtükröző T operátor hatása:

$$Tf(t) = f(-t). \tag{1.1}$$

Az időfüggő Schrödinger-egyenletben a $\partial/\partial t$ előjelet vált az időtükrözés során, amit kompenzálhatunk az $\mathrm{i} \to -\mathrm{i}$ helyettesítéssel. Így ez az alábbi kommutációs relációval fejezhető ki:

$$\left[CT, \mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right] = 0, \tag{1.2}$$

ahol C a konjugáló operátor ($CA = A^*$). A kérdés, hogy $\mathcal{H}$ mikor kommutál CT-vel. Tegyük fel, hogy a vizsgált rendszer konzervatív, ekkor $\mathcal{H}$ kommutál T-vel. Így elég csak $\mathcal{H}$-nak C-vel vett kommutációs viszonyát vizsgálni. Három eset lehetséges, amely az univerzalitási osztály koncepciójához vezet.

- Vizsgáljuk a következő Hamiltonit

  $$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\left(\overrightarrow{p} - \frac{e}{c}\overrightarrow{A}\right)^2 + V(x). \tag{1.3}$$

  Mivel $\overrightarrow{p} = (\mathrm{i}/\hbar)\nabla$ komplex operátor, $\mathcal{H}$ nem kommutál C-vel, vagyis sérül az időtükrözési szimmetriája a rendszernek. Ekkor $\mathcal{H}$ nem reprezentálható valós mátrixszal. A Hamiltoni hermitikus tulajdonságát megtartja a

  $$H' = UHU^{\dagger} \tag{1.4}$$

  transzformáció, ahol U unitér, $UU^{\dagger} = 1$.

- Most azt az esetet vizsgáljuk, amikor van időtükrözési szimmetria, de nincs spin-pálya kölcsönhatás. Egy ilyen rendszer Hamiltonija

  $$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x). \tag{1.5}$$

  Ekkor $\mathcal{H}$ kommutál C-vel. Ezért léteznek a ϕ_n közös sajátfüggvények. Mivel $C^2 = 1$, a sajátérték ± 1, vagyis

  $$C\phi_n = \phi_n^* = \pm\phi_n. \tag{1.6}$$

  Tehát ϕ_n csak valós vagy tisztán képzetes lehet. Az általánosság megszorítása nélkül ϕ_n valósnak választható (mivel a bázisfüggvények tetszőlegesen választhatók). Ekkor a Hamiltoni mátrixa szintén valós. Ezt tulajdonságot megtartja a

  $$H' = OHO^T \tag{1.7}$$

  transzformáció, ahol O ortogonális mátrix, $OO^T = 1$.

- Végül olyan rendszert tanulmányozunk, amelynek Hamiltonija rendelkezik az időtükrözési szimmetriával, és tartalmazza a spin-pálya kölcsönhatást:

$$\mathcal{H}_{SO} = A\overrightarrow{L}\overrightarrow{S}, \tag{1.8}$$

ahol

$$\overrightarrow{L} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\overrightarrow{r} \times \overrightarrow{\nabla} \qquad \text{és} \qquad \overrightarrow{S} = \frac{\hbar}{2}\overrightarrow{\sigma}. \tag{1.9}$$

A Pauli-mátrixok

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{1.10}$$

kielégítik a

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2\epsilon_{ijk}\sigma_k \qquad (i, j, k = \{x, y, z\}) \tag{1.11}$$

kommutációs relációt. Mivel $\mathcal{H}_{SO}$ komplex mennyiségeket tartalmaz, ezért a teljes Hamiltoni nem kommutál C-vel. A spin operátor mátrixát a $\overrightarrow{\tau} = \mathrm{i}\,\overrightarrow{\sigma}$ kvaterniókkal is kifejezhetjük, amelyekre teljesül, hogy

$$\tau_x^2 = \tau_y^2 = \tau_z^2 = -1 \qquad \text{és} \qquad \{\tau_i, \tau_j\} = 0. \tag{1.12}$$

Itt $\{\cdot, \cdot\}$ az antikommutátort jelöli. A kvaterniók a komplex számok négy dimenzióra történő nem-kommutatív kiterjesztései. Ezzel a teljes Hamiltoni

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_x\tau_x + \mathcal{H}_y\tau_y + \mathcal{H}_z\tau_z, \tag{1.13}$$

ahol $\mathcal{H}_0, \mathcal{H}_x, \mathcal{H}_y, \mathcal{H}_z$ valós operátorok. τ_x és τ_z azonban képzetes, ezért antikommutál C-vel. Felhasználva az antikommutációs relációkat, belátható, hogy

$$[C\tau_y, \tau_x] = [C\tau_y, \tau_y] = [C\tau_y, \tau_z] = 0. \tag{1.14}$$

Tehát a teljes Hamiltoni kommutál $C\tau_y$-nal. Ha ψ_n sajátfüggvénye $\mathcal{H}$-nak, akkor $C\tau_y\psi_n$ is sajátfüggvénye ugyanazzal a sajátértékkel. Ez a Kramer-degeneráció, amely minden feles spinű időtükrözési szimmetriával rendszerben megfigyelhető. Ha a sajátfüggvények nem ismertek, akkor hasznos, hogy a ϕ_n és $\overline{\phi}_n = C\tau_y\phi_n$ párokat válasszuk bázisfüggvényeknek. Ezzel $\mathcal{H}$ mátrixelemei

$$\mathcal{H}_{nm} = \begin{pmatrix} \langle\overline{\phi}_n|\mathcal{H}|\overline{\phi}_m\rangle & \langle\overline{\phi}_n|\mathcal{H}|\phi_m\rangle \\ \langle\phi_n|\mathcal{H}|\overline{\phi}_m\rangle & \langle\phi_n|\mathcal{H}|\phi_m\rangle \end{pmatrix}. \tag{1.15}$$

A négy mátrixelem azonban nem független. Példaként nézzük a bal felső elemet:

$$\begin{aligned}\left\langle \overline{\phi}_n \left|\mathcal{H}\right| \overline{\phi}_m \right\rangle &= \int (C\tau_y\phi_n)^\dagger \mathcal{H}(C\tau_y\phi_m)\,\mathrm{d}x = \int \left(\phi_n^\dagger\tau_y^\dagger\right)^* \mathcal{H}(\tau_y\phi_m)^*\,\mathrm{d}x \\ &= \left(\int \phi_n^\dagger\tau_y^\dagger\mathcal{H}^*\tau_y\phi_m\,\mathrm{d}x\right) = \left(\int \phi_n^\dagger\mathcal{H}\phi_m\,\mathrm{d}x\right)^* = \left(\left\langle \phi_n \left|\mathcal{H}\right| \phi_m \right\rangle\right)^*,\end{aligned} \tag{1.16}$$

ahol felhasználtuk, hogy $H^*\tau_y = \tau_y H$ és $\tau_y^\dagger\tau_y = 1$. Hasonló módon adódik, hogy

$$\left\langle \phi_n \left|\mathcal{H}\right| \overline{\phi}_m \right\rangle = -\left(\left\langle \overline{\phi}_n \left|\mathcal{H}\right| \phi_m \right\rangle\right)^*. \tag{1.17}$$

Tehát $\mathcal{H}$ egy $N \times N$-es mátrixszal reprezentálható, ahol minden elem 2×2-es (spin 2 lehetséges beállása miatt):

$$\mathcal{H}_{nm} = (\mathcal{H}_0)_{nm}\mathbb{I}_2 + \overrightarrow{\mathcal{H}}_{nm}\overrightarrow{\tau}, \tag{1.18}$$

ahol $(\mathcal{H}_0)_{nm}$ és $\overrightarrow{\mathcal{H}}_{nm}$ komponensei valósak és $\mathbb{I}_2$ a 2×2-es egységmátrix. Az ilyen tulajdonságú mátrixot hívjuk kvaternió valós mátrixnak. Ismét olyan transzformációt keresünk, amelyre invariánsak a mátrixelemek. Ezek a szimplektikus transzformációk

$$\mathcal{H}' = S\mathcal{H}S^R, \tag{1.19}$$

ahol S szimplektikus, $SS^R = 1$. Itt S^R S duálisa

$$S^R = ZS^TZ^{-1} = -ZS^TZ, \tag{1.20}$$

ahol Z mátrixelemei

$$Z_{nm} = \delta_{nm}\tau_y. \tag{1.21}$$

Az univerzalitási osztályok prezentációja ezzel teljes, végeredményben:

- Hamiltoni −időtükrözési szimmetria nélkül− hermitikus mátrixszal reprezentálható és invariáns az unitér transzformációkra,
- Hamiltoni −időtükrözési szimmetriával, spin-pálya kölcsönhatás nélkül− valós mátrixszal reprezentálható és invariáns az ortogonális transzformációkra,
- Hamiltoni −időtükrözési szimmetriával, spin-pálya kölcsönhatással− kvaternió valós mátrixszal reprezentálható és invariáns a szimplektikus transzformációkra.

2. Gausszi sokaságok

Feltesszük, hogy a H mátrix tipikus az adott osztályon (valós szimmetrikus, ill. hermitikus) belül. Ezért tulajdonságait az osztályon felvett mátrix-sokaságon számolt átlagokkal írhatjuk le. Ehhez kell egy valószínűségeloszlás az osztályra, amelyet így veszünk fel:

- a mátrixelemek független eloszlásúak (az önadjungáltság, ill. szimmetrikusság miatti kötöttségen túl),
- az eloszlás invariáns az osztályhoz rendelt transzformációra.

A következő okokból vettük fel így:

- jól egyezik a kísérletekkel,
- az elvi magyarázatot még keressük, de hozzávetőlegesen:

  a) egy bonyolult, kaotikus rendszer esetén a H_{nm} mátrixelemekben a rendszer paramétereinek a függvényében gyorsan változó fázisok kombinálódnak, így a mátrixelemek közel függetlenek,

  b) a statisztika ne változzon a bázis megváltoztatásakor.

Gausszi sokaságok megkonstruálását 2×2-es valós, szimmetrikus mátrixokon illusztráljuk, amelyek kanonikus transzformációjának csoportja $O(2)$. Keressük a $p(H)$ valószínűségi sűrűségfüggvényt a következő normálással:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}H_{11}\,\mathrm{d}H_{22}\,\mathrm{d}H_{12}\; p(H) = 1, \tag{2.1}$$

ahol H_{11}, H_{22}, H_{12} a három független mátrixelem. A fentieknek megfelelően két feltétel szükséges $p(H)$ meghatározásához. Az első, hogy $p(H)$ invariáns kell legyen a vizsgált osztályt jellemző transzformációra, esetünkben bármilyen ortogonális transzformációra, vagyis

$$p(H) = p(H'), \text{ ha } \ H' = OHO^T, \ O^T = O^{-1}. \tag{2.2}$$

A második pedig abból adódik, hogy a mátrixelemek függetlenek, vagyis a valószínűségek összeszorozhatók, azaz

$$p(H) = p_{11}(H_{11})p_{22}(H_{22})p_{12}(H_{12}). \tag{2.3}$$

Az infinitezimális ortogonális transzformáció mátrixa 2D-ben:

$$O = \begin{pmatrix} 1 & -\epsilon \\ \epsilon & 1 \end{pmatrix}, \tag{2.4}$$

amivel H' mátrixára kapjuk, hogy

$$H' = OHO^T = \begin{pmatrix} H_{11} - 2\epsilon H_{12} & \epsilon H_{11} + H_{12} - \epsilon H_{22} \\ \epsilon H_{11} + H_{12} - \epsilon H_{22} & H_{22} + 2\epsilon H_{12} \end{pmatrix}. \tag{2.5}$$

Most kihasználjuk, hogy $p(H) = p(H')$ és a valószínűség faktorizálódik (ϵ-ban sorfejtünk lineáris rendig, majd $\epsilon = 0$-t veszünk, a $'$ mindig a saját változó szerinti deriváltra utal)

$$\begin{aligned} -2H_{12}\, p'_{11}(H_{11})\, p_{22}(H_{22})\, p_{12}(H_{12}) + 2H_{12}\, p_{11}(H_{11})\, p'_{22}(H_{22})\, p_{12}(H_{12}) + \\ + (H_{11} - H_{22})\, p_{11}(H_{11})\, p_{22}(H_{22})\, p'_{12}(H_{12}) = 0, \end{aligned} \tag{2.6}$$

átrendezve

$$\frac{2}{H_{11} - H_{22}} \left(-\frac{p'_{11}(H_{11})}{p_{11}(H_{11})} + \frac{p'_{22}(H_{22})}{p_{22}(H_{22})} \right) = -\frac{1}{H_{12}} \frac{p'_{12}(H_{12})}{p_{12}(H_{12})}. \tag{2.7}$$

Az így kapott egyenlet jobb oldala csak H_{12} függvénye, míg a bal oldal H_{12}-től független, vagyis mindkét oldal csak ugyanazzal konstans értékkel lehet állandó, amit a továbbiakban $-a$-val jelölünk. A jobb oldal alapján

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}H_{12}} \log p_{12}(H_{12}) = aH_{12} \qquad \Longrightarrow \qquad p_{12}(H_{12}) = \mathrm{e}^{\frac{a}{2}H_{12}^2 + c}. \tag{2.8}$$

A bal oldal alapján pedig

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}H_{11}} \log p_{11}(H_{11}) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}H_{22}} \log p_{22}(H_{22}) = \frac{a}{2}(H_{11} - H_{22}), \tag{2.9}$$

átrendezve

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}H_{11}} \log p_{11}(H_{11}) - \frac{a}{2}H_{11} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}H_{22}} \log p_{22}(H_{22}) - \frac{a}{2}H_{22}. \tag{2.10}$$

Ismét hasonló a helyzet, a bal oldal csak H_{11} függvénye, a jobb oldal pedig H_{22} függvénye, vagyis csak ugyanazzal a b konstanssal egyezhetnek meg

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}H_{11}} \log p_{11}(H_{11}) = \frac{a}{2}H_{11} + b \qquad \Longrightarrow \qquad p_{11}(H_{11}) = \mathrm{e}^{\frac{a}{4}H_{11}^2 + bH_{11} + h}, \tag{2.11}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}H_{22}} \log p_{22}(H_{22}) = \frac{a}{2}H_{22} + b \qquad \Longrightarrow \qquad p_{22}(H_{22}) = \mathrm{e}^{\frac{a}{4}H_{22}^2 + bH_{22} + q}, \tag{2.12}$$

ahol h és q az integrációs konstansok. Mindezeket felhasználva

$$p(H) = \exp\left\{ \frac{a}{4}\left(H_{11}^2 + H_{22}^2 + 2H_{12}^2\right) + b\,(H_{11} + H_{22}) + c + h + q \right\} = C\,\mathrm{e}^{-A\,\mathrm{Tr}\,H^2 + b\,\mathrm{Tr}\,H}, \tag{2.13}$$

ahol C a normálásból határozható meg. Kikötjük, hogy ez $E = 0$-ra legyen szimmetrikus, majd toljuk el az energia nullpontját: $H_{ii} \to H_{ii} + g$. A $g = b/2A$ választással a $\mathrm{Tr}\, H = \sum_i E_i$ eltüntethető. Így végeredményben a következő gausszi valószínűségi sűrűségfüggvényt kaptuk:

$$p(H) = C\, \mathrm{e}^{-A\, \mathrm{Tr}\, H^2} = C \prod_i \mathrm{e}^{-AH_{ii}^2} \prod_{i<j} \mathrm{e}^{-2A|H_{ij}|^2} . \tag{2.14}$$

A valós véletlen mátrixok halmaza, amelynek mátrixelemei kielégítik a (2.14) eloszlást, határozzák meg a gausszi ortogonális sokaságot (GOE). Ez az eredmény érvényben marad az unitér (GUE), és a szimplektikus (GSE) esetben, továbbá tetszőleges méretű véletlen mátrixra is. Ez utóbbi állítás a két dimenziós esetből könnyen kikövetkeztethető. Vizsgáljuk az $n = 3$ esetet példaként. OHO^T transzformáció csak két dimenziós altérben forgat. A (2.7) egyenlet kiegészül a

$$+H_{13}\frac{p'_{23}}{p_{23}} - H_{23}\frac{p'_{13}}{p_{13}}$$

tagokkal. Ezek összege csak H_{13} és H_{23} függvénye, míg a többi tag ezektől független. Vagyis ez a rész konstans. Az erre vonatkozó egyenleteket megoldva, kiderül, hogy a konstans értéke nulla. Vagyis visszakaptuk az eredeti egyenleteket. Így az eljárás kiterjeszthető tetszőleges $n \geq 2$ dimenzióra.

3. Sajátenergiák együttes eloszlása

A (2.14) eloszlás alapján a H sajátértékeire redukált eloszlások is kiszámolhatók. Ehhez szükséges, hogy a H_{ij} elemeket, mint független változókat, lecseréljük egy másik azonos dimenziójú halmazra, amelynek alhalmazát képezik a sajátértékek. A megmaradó változók (amelyekre majd kiintegrálunk) parametrizálják a transzformációt, amellyel H diagonalizálható.

Az eljárást először a legegyszerűbb esetben, a 2×2-es valós, szimmetrikus mátrixokon mutatjuk meg. A két sajátérték

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \pm \frac{1}{2}\left[(H_{11} - H_{22})^2 + 4H_{12}\right]^{1/2}. \tag{3.1}$$

A H-t diagonalizáló ortogonális transzformáció

$$O = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}, \tag{3.2}$$

amivel

$$H = O \begin{pmatrix} E_+ & 0 \\ 0 & E_- \end{pmatrix} O^T = \begin{pmatrix} E_+ \cos^2\theta + E_- \sin^2\theta & (E_+ - E_-)\cos\theta\sin\theta \\ (E_+ - E_-)\cos\theta\sin\theta & E_+ \sin^2\theta + E_- \cos^2\theta \end{pmatrix}. \tag{3.3}$$

A transzformáció Jacobi-mátrixa

$$J = \det\frac{\partial(H_{11}, H_{22}, H_{12})}{\partial(E_+, E_-, \theta)} = E_+ - E_-, \tag{3.4}$$

amivel felírható a sajátenergiák együttes valószínűségi sűrűsége (θ szögre kiintegráltunk)

$$p(E_+, E_-) = C|E_+ - E_-|\, \mathrm{e}^{-A\left(E_+^2 + E_-^2\right)}. \tag{3.5}$$

Az előbbiek könnyen általánosíthatók $N \times N$-es valós, szimmetrikus H mátrixokra. A H mátrixot diagonalizáló ortogonális transzformáció

$$H = OH_DO^T, \text{ vagy indexesen } H_{nm} = \sum_k O_{nk}E_kO_{mk}, \tag{3.6}$$

ahol $(H_D)_{kl} = E_k\delta_{kl}$ a diagonális mátrix. Könnyen látható, hogy az O ortogonális mátrixnak $N(N-1)/2$ független θ_l változója van. Ugyanis egy N hosszúságú egységvektornak $N-1$ független eleme van (normálás miatt), a másodiknak így már csak $N-2$ független eleme lehet (mivel merőleges az előzőre), és így tovább. Tehát a független változók száma: $(N-1)+(N-2)+...+1 = N(N-1)/2$. Figyelembe véve még az N db E_n sajátenergiát, visszakapjuk, hogy a H mátrixnak $N(N+1)/2$ független eleme van (az átlóbeli és a felette levő elemek száma). Legyen $\alpha = \{\theta_1, \theta_2, ..., \theta_{N(N-1)/2}\}$, $h_D = \{E_1, E_2, ..., E_N\}$ és $h = \{H_1, H_2, ..., H_{NN}, H_{12}, H_{13}, ..., H_{N-1,N}\}$. Az együttes eloszlás az új változókkal

$$p(h)\,\mathrm{d}h \sim \mathrm{e}^{-A\sum_k E_k^2}\,|J|\,\mathrm{d}h_D\,\mathrm{d}\alpha, \tag{3.7}$$

ahol felhasználtuk, hogy

$$\mathrm{Tr}\,H^2 = \mathrm{Tr}\left(ODO^TODO^T\right) = \mathrm{Tr}\,D^2 = \sum_k E_k^2. \tag{3.8}$$

Még ki kell számolnunk a transzformáció Jacobi determinánsát

$$|J| = \left|\frac{\partial h}{\partial(h_D, \alpha)}\right|. \tag{3.9}$$

Ehhez deriváljuk E_k és θ_l szerint a (3.6) egyenletet

$$\frac{\partial H}{\partial E_k} = O\frac{\partial H_D}{\partial E_k}O^T, \tag{3.10}$$

és

$$\frac{\partial H}{\partial \theta_l} = \frac{\partial O}{\partial \theta_l}H_DO^T + OH_D\frac{\partial O^T}{\partial \theta_l} = O(S^{(l)}H_D - H_DS^{(l)})O^T, \tag{3.11}$$

ahol bevezettük az S mátrixot

$$S^{(l)} = O^T\frac{\partial O}{\partial \theta_l} = -\frac{\partial O^T}{\partial \theta_l}O. \tag{3.12}$$

Az S mátrix antiszimmetriája könnyen látható, ha felhasználjuk, hogy $OO^T = 1$ és H_D-t fixen az egységmátrixnak választjuk. Számoljuk ki a mátrixelemeket:

$$\left(\frac{\partial H}{\partial E_k}\right)_{ij} = \left(O\frac{\partial H_D}{\partial E_k}O^T\right)_{ij} = O_{im}\delta_{mk}\delta_{nk}O^T_{nj} = O_{ik}O_{jk}, \tag{3.13}$$

és

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial H}{\partial \theta_l}\right)_{ij} &= \sum_{m,n} O_{in}\left(S^{(l)}_{nm}E_m - E_nS^{(l)}_{nm}\right)O^T_{mj} = \\ = \sum_{n<m} O_{in}S^{(l)}_{nm}(E_m - E_n)O_{jm} &+ (n \leftrightarrow m \text{ csere}) = \\ &= \sum_{n<m}\left(O_{in}O_{jm} + O_{im}O_{jn}\right)S^{(l)}_{nm}(E_m - E_n).\end{aligned} \tag{3.14}$$

Tehát a Jacobi mátrix felírható két $\frac{1}{2}N(N+1) \times \frac{1}{2}N(N+1)$-es mátrix szorzataként:

$$J_{nm,ka} = \sum_{i,j}\hat{O}_{nm,ij}M_{ij,ka}, \tag{3.15}$$

ahol

$$\hat{O}_{nm,ij} = O_{ni} O_{mj}, \tag{3.16}$$

és

$$M = \begin{pmatrix} \delta_{ij} & 0 \\ 0 & S_{ij}^{(l)}(E_j - E_i) \end{pmatrix}. \tag{3.17}$$

A sorrend az oszlopokban: először az N db H_{ii} jön, amit $\frac{1}{2}N(N-1)$ db H_{ij} követ ($i > j$). A sorokban pedig az N db E_k sajátértéket az $\frac{1}{2}N(N-1)$ db θ_l követ. A fentiek alapján már számolható a Jacobi determináns:

$$|J| = |\hat{O}| \cdot |M| = |\hat{O}| \cdot |S| \prod_{m>n} (E_m - E_n) = f(\alpha) \prod_{m>n} (E_m - E_n), \tag{3.18}$$

ahol S $\frac{1}{2}N(N+1) \times \frac{1}{2}N(N+1)$-es méretű mátrix, melynek elemei: $S_{ij}^{(l)}$. A szögekre való kiintegrálás után kapjuk, hogy

$$p(E_1, ..., E_n) = C \prod_{n>m} (E_n - E_m)\, \mathrm{e}^{-A \sum_k E_k^2}. \tag{3.19}$$

Mindhárom univerzalitási osztályra érvényes eredmény összefoglalható az alábbi formulával:

$$\begin{aligned} p(E_1, ..., E_n) =& C \prod_{n>m} (E_n - E_m)^\beta\, \mathrm{e}^{-A \sum_k E_k^2}, \\ & \text{GOE esetén } \beta = 1, \\ & \text{GUE esetén } \beta = 2, \\ & \text{GSE esetén } \beta = 4. \end{aligned} \tag{3.20}$$

4. Állapotsűrűség meghatározása

Két módszert ismertetünk az állapotsűrűség számolására. Elsőként az együttes eloszlásból határozzuk meg az állapotsűrűséget Coulomb-gáz módszerrel, majd a Green-függvényes technikát mutatjuk be, amely csak az alapelveket használja fel.

4.1. Coulomb-gáz módszer

A sajátértékek együttes eloszlása felfogható egy 2D-s töltött részecskékből álló gáz Boltzmann-faktorként. A potenciális energiát minimalizálva kapjuk a Coulomb-gáz egyensúlyi sűrűségét, és ez a sűrűség azonosítható a megfelelő gausszi-soksaság állapotsűrűségével.

A (3.20) eloszlás a következőképpen is írható:

$$p(E_1, ..., E_n) = C\,\mathrm{e}^{-\frac{W}{kT}}, \tag{4.1}$$

ahol

$$W(E_1, ..., E_n) = kTA \sum_k E_k^2 - kT \sum_{i>j} \beta \log |E_i - E_j|. \tag{4.2}$$

Vizsgáljunk egy N pontszerű töltésből álló gázt. A töltések koordinátái $x_1, x_2, ..., x_n$, és szabadon mozoghatnak az $-\infty < x < \infty$ egyenes mentén. A rendszer potenciális energiája

$$V = \frac{1}{2} \sum_i x_i^2 - \sum_{i>j} \log |x_i - x_j|, \tag{4.3}$$

ahol az első tag egy harmonikus potenciált reprezentál, a második pedig az elektrosztatikus taszítást a töltések között (2D). Tegyük fel, hogy a gáz termodinamikai egyensúlyban van T hőmérsékleten. Így a koordináták együttes eloszlása

$$p(x_1, x_2, ..., x_n) = C\,\mathrm{e}^{-V/kT}, \tag{4.4}$$

ahol k a Boltzmann-állandó. Az E_k energiákat az x_k koordinátáknak megfeleltetve látható az analógia a töltött részecskékből álló 2D-s gázzal.

Legyen $a = kTA$ és $b = kT\beta$. A potenciális energiát az alábbi integrállal közelítjük

$$W \approx a \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \rho(x)\,\mathrm{d}x - \frac{b}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \log |x - y| \rho(x) \rho(y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y, \tag{4.5}$$

ahol a $\rho(x) \geq 0$ állapotsűrűségre teljesül, hogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)\,\mathrm{d}x = N, \tag{4.6}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \rho(x)\,\mathrm{d}x = \sum_k E_k^2. \tag{4.7}$$

$\rho(x)$ függvényt varációsan határozzuk meg, ehhez a (4.6) mellékfeltétel mellett (λ Lagrange-multiplikátorral vesszük figyelembe) kell megkeresnünk W minimumát. Vagyis:

$$\frac{\delta}{\delta\rho(x)}\left[W - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x')\,\mathrm{d}x'\right] = 0 \tag{4.8}$$

A számolás során felhasználjuk az alábbi szabályt:

$$\frac{\delta\rho(x')}{\delta\rho(x)} = \delta(x - x'). \tag{4.9}$$

Ezzel a (4.8) egyenlet bal oldala:

$$\frac{\delta}{\delta\rho(x)}\left[a\int_{-\infty}^{\infty} x'^2\rho(x')\,\mathrm{d}x' - \frac{b}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \log|x'-y|\rho(x')\rho(y)\,\mathrm{d}x'\,\mathrm{d}y - \lambda\int_{-\infty}^{\infty}\rho(x')\,\mathrm{d}x'\right]. \tag{4.10}$$

Az első tagra elvégezve a variálást:

$$a\int_{-\infty}^{\infty} x'^2\delta(x-x')\,\mathrm{d}x' = ax^2, \tag{4.11}$$

a második tagra:

$$\begin{aligned}
&-\frac{b}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \log|x'-y|\delta(x-x')\rho(y)\,\mathrm{d}x'\,\mathrm{d}y - \\
&-\frac{b}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \log|x'-y|\delta(x-y)\rho(x')\,\mathrm{d}x'\,\mathrm{d}y = \%.
\end{aligned} \tag{4.12}$$

A kifejezés második tagjában $x' \leftrightarrow y$ cserét elvégezve, adódik, hogy

$$\% = -b\int_{-\infty}^{\infty} \log|x-y|\rho(y)\,\mathrm{d}y. \tag{4.13}$$

Az utolsó, harmadik tag variálása pedig a $-\lambda$ eredményt adja. Így végül:

$$ax^2 - b\int_{-\infty}^{\infty} \log|x-y|\rho(y)\,\mathrm{d}y - \lambda = 0, \tag{4.14}$$

amiből x szerinti deriválással

$$x = \frac{b}{2a}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(y)}{x-y}\,\mathrm{d}y. \tag{4.15}$$

Az egyenletet kielégítő állapotsűrűség alakját levezetés nélkül közöljük. Legyen $b/2a = 1$, ekkor

$$\rho(x) = \begin{cases} \frac{1}{\pi}\sqrt{2N - x^2} & \text{ha } |x| < \sqrt{2N}, \\ 0 & \text{ha } |x| > \sqrt{2N}\ . \end{cases} \tag{4.16}$$

Ez a Wigner-féle félkör szabály.

4.2. Green-függvényes eljárás

Az állapotsűrűség definicó szerint

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n). \tag{4.17}$$

Ezt szeretnénk más alakban felírni. Ehhez a Dirac-delta függvényt a Lorentz-görbe határértékeként írjuk fel:

$$\delta(E) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{\epsilon}{\pi} \frac{1}{E^2 + \epsilon^2}. \tag{4.18}$$

Ezzel az állapotsűrűség

$$\rho(E) = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{\epsilon}{\pi} \sum_n \frac{1}{(E - E_n)^2 + \epsilon^2} = - \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\pi} \mathrm{Im} \left(\sum_n \frac{1}{E - E_n + \mathrm{i}\,\epsilon} \right). \tag{4.19}$$

Felhasználva, hogy

$$\sum_n \frac{1}{E - E_n} = \mathrm{Tr} \left(\frac{1}{E - H} \right), \tag{4.20}$$

az állapotsűrűség felírható, mint

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im} \left[\mathrm{Tr} \left(\frac{1}{E - H} \right) \right]. \tag{4.21}$$

Az utolsó egyenletben az $\epsilon \to 0$ limeszt már nem írtuk ki, amikor ilyen kifejezést látunk a későbbiekben, akkor értelem szerint figyelembe kell venni. Az állapotsűrűség így kapcsolatba hozható a Green-függvénnyel (koordináta-rep.)

$$\mathcal{G}(q_A, q_B, E) = \sum_n \frac{\psi_n^*(q_A) \psi_n(q_B)}{E - E_n} = \sum_n \psi_n^*(q_A) \frac{1}{E - H} \psi_n(q_B), \tag{4.22}$$

ahol $\psi_n(q)$-k a H sajátfüggvényei, E_n sajátértékkel. Felhasználva, hogy

$$\sum_n \psi_n^*(q_A) \psi_n(q_B) = \delta(q_A - q_B) = \int \delta(q_A - q) \delta(q_B - q)\,\mathrm{d}q, \tag{4.23}$$

a Green-függvény felírható, mint

$$\mathcal{G}(q_A, q_B, E) = \int \delta(q_A - q) \frac{1}{E - H} \delta(q_B - q)\,\mathrm{d}q = \left\langle q_A \left| \frac{1}{E - H} \right| q_B \right\rangle, \tag{4.24}$$

ahol kihasználtuk, hogy a Dirac-delta a sajátfüggvénye a koordináta-operátornak. Innen pedig

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im} \left(\mathrm{Tr}\, \mathcal{G} \right). \tag{4.25}$$

Vagyis az alábbi mennyiséget kell kiszámolnunk:

$$S = \left\langle \operatorname{Tr}\left(\frac{1}{E-H}\right)\right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\langle \operatorname{Tr} H^n \rangle}{E^{n+1}}. \tag{4.26}$$

Ez a Taylor-sor csak akkor konvergens, ha $|E| > \max|E_k|\ \forall k$ sajátértékre. De az állapotsűrűség számolása során a sajátértékek tartományában vagyunk, azaz divergál a fenti sor. A problémát úgy oldjuk meg, hogy előbb elfelejtkezve erről a gondról, kiszámoljuk S-et, majd megszerkesztjük a megoldás analitikus folytatását a divergens tartományban.

A (2.14) eloszlásból látható, hogy

$$\left\langle H_{ij}^2 \right\rangle = \langle H_{ij} H_{ji} \rangle = \begin{cases} i = j & \longrightarrow \frac{1}{2A} \\ i \neq j \begin{cases} \text{GOE} \longrightarrow \frac{1}{4A} \\ \text{GUE} \longrightarrow \frac{1}{2A} \end{cases} \end{cases}, \tag{4.27}$$

viszont

$$H_{\alpha\beta} H_{\gamma\delta} = 0 \qquad \text{ha } (\alpha, \beta) \neq (\gamma, \delta). \tag{4.28}$$

A (4.27) egyenletből

$$\left\langle \operatorname{Tr} H^2 \right\rangle = \sum_{\alpha,\beta} \left\langle |H_{\alpha\beta}|^2 \right\rangle = \frac{N^2}{2A}, \tag{4.29}$$

szimmetria alapján látható, hogy

$$\left\langle \operatorname{Tr} H^{2n+1} \right\rangle = 0. \tag{4.30}$$

Az első nem triviális eset az $n = 4$,

$$\left\langle \operatorname{Tr} H^4 \right\rangle = \left\langle \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} H_{\alpha\beta} H_{\beta\gamma} H_{\gamma\delta} H_{\delta\alpha} \right\rangle. \tag{4.31}$$

Ehhez a $H_{\alpha\beta} = H_{\beta\alpha}$ párok adnak járulékot. Bevezetjük a $\overbracket{H_{\alpha\beta} H_{\gamma\delta}}$ jelölést, amely arra utal, hogy csak az $(\alpha, \beta) = (\gamma, \delta)$ párokat kell figyelembe venni az összegzés során. Így 4 tag marad:

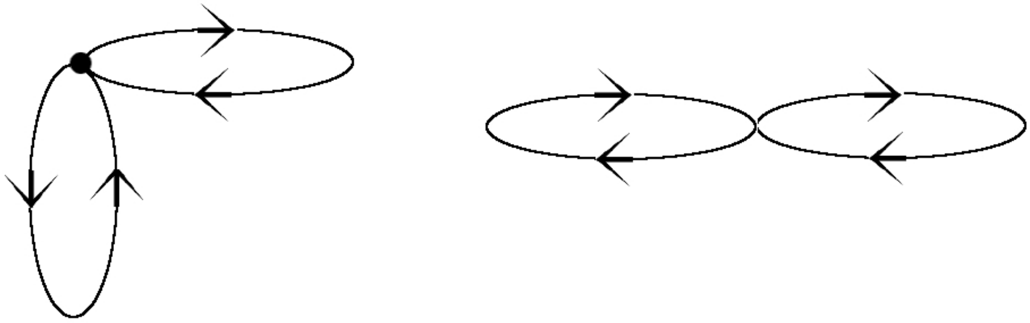
$$\left\langle \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \overbracket{H_{\alpha\beta} H_{\beta\gamma}}\, \overbracket{H_{\gamma\delta} H_{\delta\alpha}} \right\rangle = \left\langle \sum_{\alpha,\beta,\delta} H_{\alpha\beta} H_{\beta\alpha} H_{\alpha\delta} H_{\delta\alpha} \right\rangle = \mathcal{O}(N^3), \tag{4.32}$$

$$\left\langle \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \overbracket{H_{\alpha\beta}\, \underbracket{H_{\beta\gamma} H_{\gamma\delta}}\, H_{\delta\alpha}} \right\rangle = \left\langle \sum_{\alpha,\beta,\gamma} H_{\alpha\beta} H_{\beta\gamma} H_{\gamma\beta} H_{\beta\alpha} \right\rangle = \mathcal{O}(N^3), \tag{4.33}$$

$$\left\langle \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} H_{\alpha\beta} H_{\beta\gamma} H_{\gamma\delta} H_{\delta\alpha} \right\rangle = \left\langle \sum_{\alpha,\beta} H_{\alpha\beta}\, \overbracket{H_{\beta\beta} H_{\beta\alpha} H_{\alpha\alpha}} \right\rangle = \left\langle \sum_{\alpha} H_{\alpha\alpha}^4 \right\rangle = \mathcal{O}(N), \tag{4.34}$$

$$\left\langle \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \overline{H_{\alpha\beta} H_{\beta\gamma} H_{\gamma\delta} H_{\delta\alpha}} \right\rangle = \left\langle \sum_{\alpha,\beta} |H_{\alpha\beta}|^4 \right\rangle = \mathcal{O}(N^2). \tag{4.35}$$

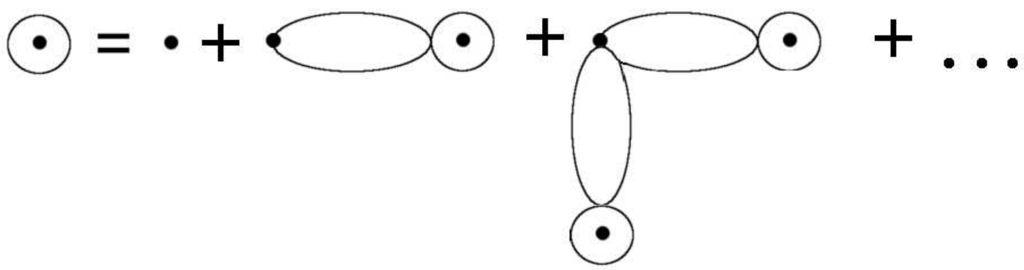
Jól látszik, hogy a nagy N-ek limeszében az első két tag a domináns. A két tagot az alábbi gráfokkal reprezentálhatjuk:



A jobb oldali gráf 1 ágú, míg a bal oldalin 2 ág különböztethető meg. A gráfokat csoportosíhatjuk az ágak szerint. Jelöljük az összes gráf járulékát g-vel, ill. grafikusan egy körrel, aminek a közepén egy pont van. Ezzel $S = Ng/E$. Tetszőleges alacsonyabb rendű gráfhoz egy buborékot rendelünk. Egy buborék járuléka

$$b = \frac{N}{2AE^2}. \tag{4.36}$$

Így g-re egy mértani sort kapunk



$$g = 1 + bg + b^2 g^2 + ..., \tag{4.37}$$

amit felösszegezve

$$g = \frac{1}{1 - bg}. \tag{4.38}$$

Innen

$$S(E) = \frac{NE}{g} = EA\left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{2N}{AE^2}}\right). \tag{4.39}$$

$E \to \infty$ esetén $S \to 0$, ebből következik, hogy a negatív előjel a helyes. Tehát

$$\langle \rho(E) \rangle = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im}\left[\lim_{\epsilon \to 0} S(E + \mathrm{i}\,\epsilon)\right] = \begin{cases} \frac{A}{\pi}\sqrt{\frac{2N}{A} - E^2} & \text{ha } |E| < \frac{\sqrt{2N}}{A}, \\ 0 & \text{ha } |E| > \frac{\sqrt{2N}}{A}. \end{cases} \tag{4.40}$$

$E \to 0$ limeszben

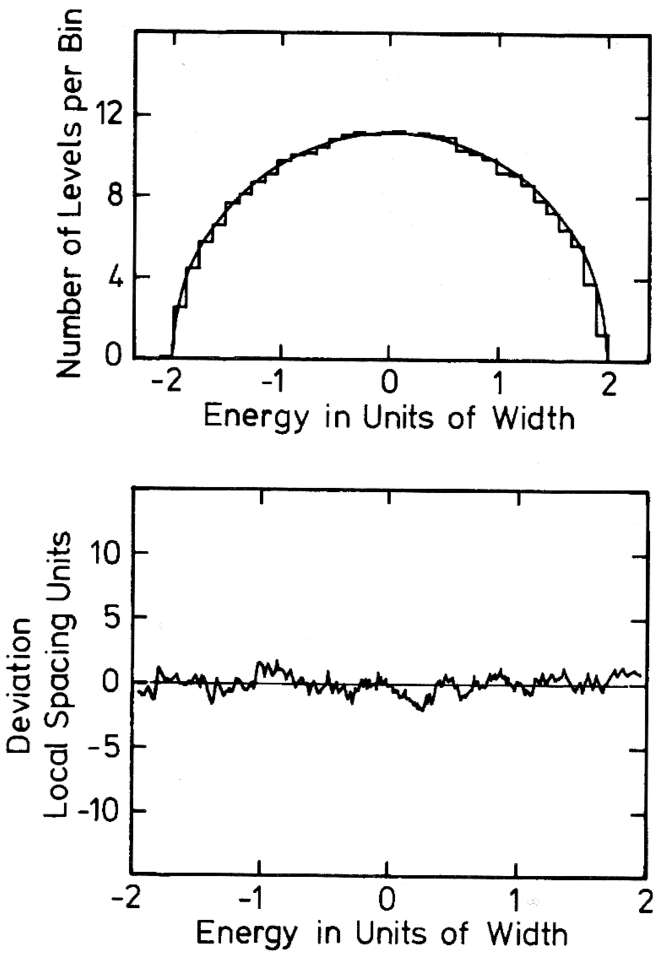
$$\langle \rho(E \to 0) \rangle = \frac{\sqrt{2NA}}{\pi}. \tag{4.41}$$

Általában ezt a mennyiséget szoktuk egyre normálni, ezért

$$A = \frac{\pi^2}{2N}, \tag{4.42}$$

$$\langle \rho(E) \rangle = \begin{cases} \sqrt{1 - \left(\frac{\pi E}{2N}\right)^2} & \text{ha } |E| < \frac{2N}{\pi}, \\ 0 & \text{ha } |E| > \frac{2N}{\pi}. \end{cases} \tag{4.43}$$

Minden gausszi sokaságra hasonló félkör szabály vezethető le. A 4.1. ábrán egy numerikus példa látható a GOE esetről.



4.1. ábra. Az állapotsűrűség egy 50 mátrixból (a rang 294) álló GOE sokaságra (felső ábra), és az eltérés a Wigner-féle félkör szabálytól (alsó ábra)

5. Szinttávolság statisztika

A legközelebbi energiaszintek távolságának eloszlását akarjuk meghatározni. A számolást 2×2 mátrixok gausszi sokaságán mutatjuk be. A szinttávolság eloszlása

$$\begin{aligned} p(s) &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}E_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}E_2 \; p(E_1, E_2) \delta(s - |E_1 - E_2|) = \\ &= C \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}E_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}E_2 \; |E_1 - E_2|^{\beta} \, \mathrm{e}^{-A \sum_n E_n^2} \, \delta(s - |E_1 - E_2|). \end{aligned} \tag{5.1}$$

Az A és C konstansok a normálási feltételekből határozhatók meg:

$$\int_0^{\infty} p(s) \, \mathrm{d}s = 1, \tag{5.2}$$

$$\int_0^{\infty} s \; p(s) \, \mathrm{d}s = 1. \tag{5.3}$$

Az integrálokat elvégezve kapjuk az ún. Wigner-eloszlásokat:

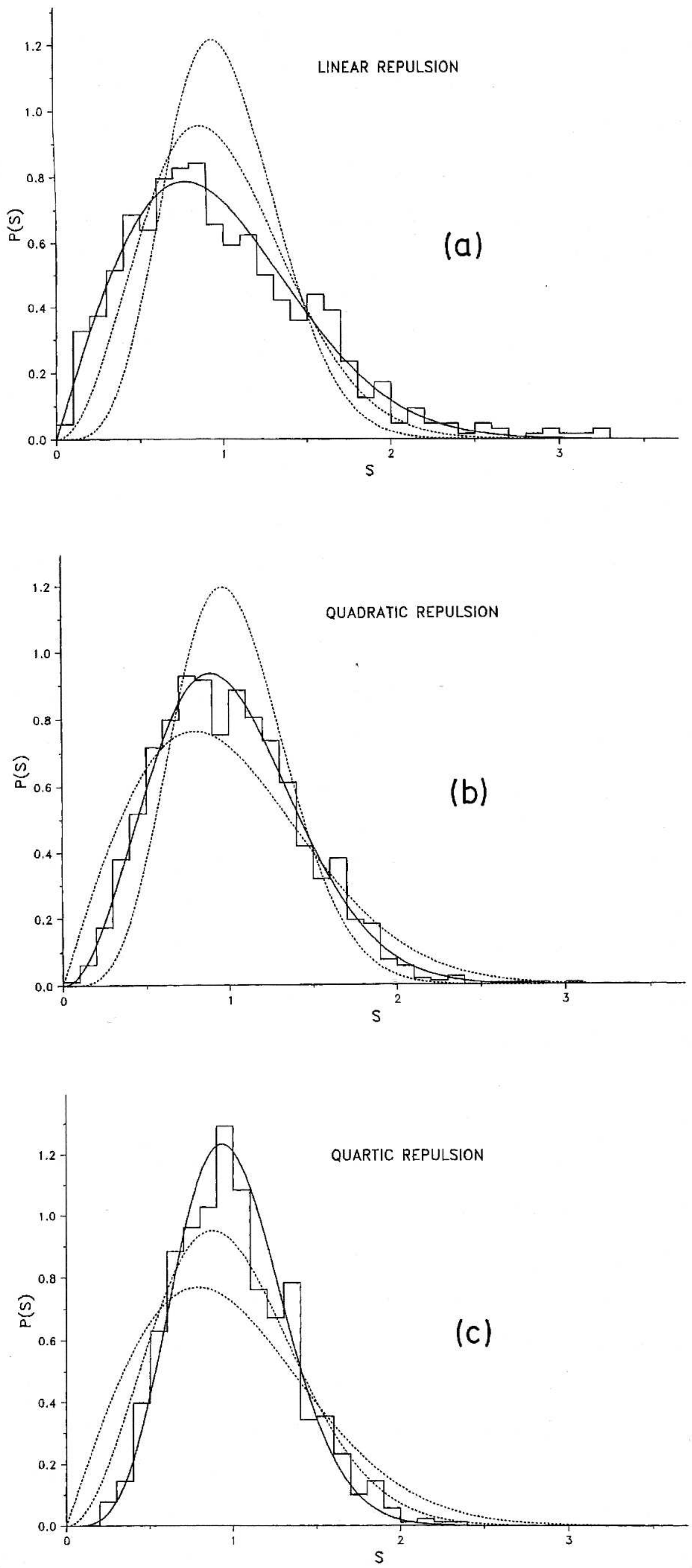
$$p(s) = \begin{cases} \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right) & \text{ha } \beta = 1 \text{ (GOE)} \\ \frac{32}{\pi^2} s^2 \exp\left(-\frac{4}{\pi} s^2\right) & \text{ha } \beta = 2 \text{ (GUE)} \\ \frac{2^{18}}{3^6 \pi^3} s^4 \exp\left(-\frac{64}{9\pi} s^2\right) & \text{ha } \beta = 4 \text{ (GSE)} \end{cases} . \tag{5.4}$$

Bár a levezetés a 2×2-es esetre vonatkozott, a kapott eredmény a magasabb rangú mátrixokból álló sokaság szinttávolság statisztikáját is jól közelíti.

Példaként vizsgáljunk meg egy $1/2$ spinű részecskét 3D-s anharmonikus oszcillátor potenciálban. A rendszerünket leíró Hamiltoni:

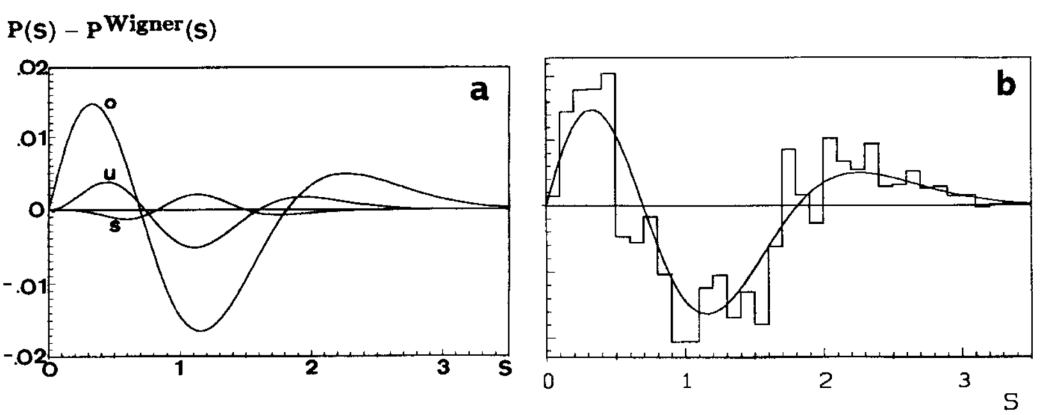
$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + x^4 + \frac{1}{2} y^4 + \frac{1}{10} z^4 + 12x^2y^2 + 14x^2z^2 + 16y^2z^2 + r^2 z(ax + by) + cr \overrightarrow{L} \overrightarrow{S}, \tag{5.5}$$

ahol $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. A rendszer viselkedését az a és b paraméterek határozzák meg. $a = b = 0$ esetén három reflexiós szimmetria van az xy, xz és yz síkoknak megfelelően. Ebben az esetben $\mathcal{H}$ mártixa valós lesz. Így a rendszer a GOE osztályba tartozik, a spin-pálya kölcsönhatás ellenére. Amennyiben a vagy b különbözik nullától, az egyik reflexiós szimmetria megszűnik, és így (a spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében) a rendszer GUE osztályhoz fog tartozni. Amennyiben egyik paraméter sem nulla, a korábbi szimmetriák megszűnnek, és végül GSE rendszert kapunk. Ezt szemléleti az 5.1. ábra. Megfigyelhető, hogy a három sokaságnál lényegesen különböző a közeli szintek taszítása, ami megfelel annak, hogy kicsi s-re $p(s) \sim s^{\beta}$.



5.1. ábra. 3D-s anharmonikus oszcillátor szinttávolság statisztikája: (a) $a = 0, b = 0$; (b) $a = 0, b \neq 0$; (c) $a \neq 0, b \neq 0$. A folytonos görbék rendre a GOE, GUE, és GSE számolásoknak felelnek meg.

Az 5.2.(a) ábrán az egzakt szinttávolság eloszlás és az (5.4) közelítést ábrázoltuk mindhárom sokaságra. A legnagyobb eltérés a GOE esetén figyelhető meg, de itt sem nagyobb, mint 2%. A másik két sokaság esetén pedig 1% alatti az eltérés. Az 5.2.(b) ábrán a rúgdosott pörgettyűk osztályából látható egy példa, amik az ún. Floquet rendszerek közé tartoznak. Itt az energiák szerepét kvázi-energiák veszik át, ezek eloszlását mutatja az ábra. Belátható, hogy a konzervatív és a Floquet rendszerek szinttávolság eloszlása azonos a nagy N-ek limeszében.



5.2. ábra. (a) Az egzakt szinttávolság eloszlás eltérése a Wigner-eloszlástól a három gausszii sokaságra. (b) Numerikus igazolás GOE sokaságra (rúgdosott pörgettyű időtükrözési szimmetriával).

Bohigas, Giannoni és Schmit nevéhez fűződik az alábbi sejtés megfogalmazása (BGS-sejtés):
Klasszikusan kaotikus rendszerek energiaszintjei úgy oszlanak el, mint a megfelelő véletlen mátrixokból álló sokaság sajátértékei.
Amint láttuk, a szinttávolság statisztika pedig univerzális, vagyis a rendszer szimmetriái határozzák meg. Amennyiben van időtükrözési szimmetriája a rendszernek, akkor a GOE, ha ez sérül, akkor a GUE a megfelelő sokaság.

6. Integrálható és nemintegrálható rendszerek közti átmenet

A valós rendszerek többsége nemintegrélható vagy nem teljesen kaotikus, de rendelkezik egy kevert klassikus fázistérrel. Ilyen rendszerekben a szinttávolság eloszlása a Poisson és a Wigner-féle viselkedés között van.

A fenomenológikus Brody-féle megközelítést mutatjuk be. Itt a taszítást jellemző ν exponenst módosítjuk, amellyel átléphetünk az integrálhatóból a nemintegrálható tartományba. Feltételezzük, hogy a valószínűségi sűrűség

$$r(s) = As^{\nu}. \tag{6.1}$$

Hogy találjunk egy sajátértéket az s hosszú intervallumban, a szinttávolság eloszlást az alábbi egyenletből határozzuk meg

$$p(s)\,\mathrm{d}s = \left(\int_0^{\infty} p(s)\,\mathrm{d}s\right) r(s)\,\mathrm{d}s. \tag{6.2}$$

Az egyenlet annak a $p(s)\,\mathrm{d}s$ valószínűséget fejezi ki, hogy a sajátértéket egy adott sajátérték mellett, s és $s + \mathrm{d}s$ közti tartományban találjuk. Ezt a valószínűséget írjuk fel szorzatként. Az első tényező annak a valószínűsége, hogy a következő sajátérték az s-nél nagyobb tartományba esik. A második tényező pedig annak a valószínűsége, hogy a sajátértékeket az s és $s + \mathrm{d}s$ közti tartományban találjuk. Innen integrálással adódik, hogy

$$p(s) = Cr(s)\exp\left(-\int_0^{s} r(s')\,\mathrm{d}s'\right). \tag{6.3}$$

Ezt visszahelyettesítjük a (6.1) egyenletbe és figyelembe vesszük a normálási feltételeket

$$\int_0^{\infty} p(s)\,\mathrm{d}s = 1, \tag{6.4}$$

$$\int_0^{\infty} sp(s)\,\mathrm{d}s = 1, \tag{6.5}$$

így kapjuk a Brody-eloszlást

$$p(s) = (\nu+1)a_{\nu}s^{\nu}\exp\left(-a_{\nu}s^{\nu+1}\right), \tag{6.6}$$

ahol

$$a_{\nu} = \left[\Gamma\left(\frac{\nu+2}{\nu+1}\right)\right]^{\nu+1}, \tag{6.7}$$

$$\Gamma(\nu) = \int_0^{\infty} x^{\nu+1}\,\mathrm{e}^{-x}\,\mathrm{d}x. \tag{6.8}$$

ν a Brody paraméter. $\nu = 0$ esetén a Poisson-eloszlást, $\nu = 1$-re pedig a GOE sokaságra vonatkozó Wigner-eloszlást kapjuk vissza. Így a Brody-eloszlás felfogható, mint egy interpoláció az integrálható és nemintegrálható tartomány között. Sajnos a levezetésnek van egy hiányossága. A (6.2) egyenlet jobb oldalán a valószínűsgeknek függetlennek kell lenni. Ez $\nu = 0$ esetén igaz csak. Viszont a többi esetben maximum kvalitatív állításként kezelhető.

7. Időben periódikus rendszerek

A spektroszkópikus technikák alapja az oszcilláló elektromos és mágneses mezők alkalmazása, pl. NMR, ESR, vagy lézer spektroszkópia. Ezekben közös, hogy a Hamiltoni időben periódikus

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + V(t), \tag{7.1}$$

ahol $\mathcal{H}_0$ a mag vagy az atom Hamiltonija, és $V(t) = V(t+\tau)$ írja le a csatolást az oszcilláló térrel. Ekkor az energia is változik időben. De $\mathcal{H}$ még mindig invariáns az időeltolással szemben. Jelöljük $\psi_n(x,t)$-vel a T_τ operátorral szimultán sajátfüggvényeket:

$$T_\tau \psi_n(x,t) = \psi_n(x,t+\tau) = \lambda_n \psi_n(x,t). \tag{7.2}$$

Hogy a megoldás stacionárius legyen, λ_n csak egységnyi abszolútértékű komplex szám lehet

$$\psi_n(x,t+\tau) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\phi_n}\,\psi_n(x,t) \tag{7.3}$$

Ezzel ekvivalens megfogalmazás

$$\psi_n(x,t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\omega_n t}\,u_n(x,t), \tag{7.4}$$

ahol $u_n(x,t)$ periodikus időben, $u(x,t+\tau) = u(x,t)$, és $\omega_n = \phi_n/\tau$. Ez a Floquet-tétel, ami a szilfizből ismert Bloch-tétellel analóg. A képlet alapján bevezethetjük az alábbi kvázi-energiát

$$\overline{E}_n = \hbar\omega_n = \frac{\hbar}{\tau}\phi_n. \tag{7.5}$$

A ϕ_n Floquet-fázis egy 2π-vel szorzott egész szám erejéig határozatlan, a kvázi-energiák pedig h/τ-val szorzott egész szám erejéig. Konvencionálisan Floquet-rendszerekben az első Brillouin-zónát a

$$\left[-\frac{h}{2\tau}, \frac{h}{2\tau}\right]$$

tartományba vesszük fel. Az $U(t)$ időfejlesztő operátort az alábbi egyenlet definiálja

$$\psi(x,t) = U(t)\psi(x,0). \tag{7.6}$$

Visszahelyettesítve az időfüggő Schrödinger-egyenletbe, kapjuk, hogy

$$\mathrm{i}\,\hbar\dot{U} = \mathcal{H}U, \tag{7.7}$$

amelyet az $U(0) = 1$ kezdeti feltétellel kell megoldanunk. Abból, hogy a Hamiltoni hermitikus, azonnal következik, hogy U unitér. A (7.6) egyenlet alapján belátható, hogy

$$U(n\tau) = [U(\tau)]^n. \tag{7.8}$$

Stroboszkópikus megfigyelés ($t = n\tau, n = 0, 1, ...$) esetén elég $U(\tau)$-t ismerni. Mivel $U(\tau)$ unitér, diagonalizálható az

$$U = V^\dagger U_D V \tag{7.9}$$

transzformációval, ahol U_D diagonális mátrix és

$$(U_D)_{nn} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\phi_n}\,. \tag{7.10}$$

U sajátfázisai egzaktul megegyeznek a Floquet-fázisokkal. Így a Floquet-rendszerek tanulmányozása $U(\tau)$ sajátfázisainak vizsgálatára redukálódik. Ezt az operátor a továbbiakban Floquet-operátornak hívjuk, és F-fel jelöljük.

Példaként vizsgáljunk egy periodikusan rúgdosott rendszert, amelynek Hamiltonija

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V_0 \sum_n \delta(t - n\tau). \tag{7.11}$$

A Dirac-delta függvényt $\Delta\tau$ széles és $(\Delta\tau)^{-1}$ magas téglappal közelítjük, azaz

$$\mathcal{H}(t) = \begin{cases} \mathcal{H}_0 & n\tau < t < (n+1)\tau - \Delta\tau \\ \mathcal{H}_0 + \frac{1}{\Delta\tau} V_0 & (n+1)\tau - \Delta\tau < t < (n+1)\tau \end{cases}\,. \tag{7.12}$$

Ekkor $0 < t < \tau - \Delta\tau$-ra

$$U(t) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{H}_0 t\right), \tag{7.13}$$

és $\tau - \Delta\tau < t < \tau$-ra

$$U(t) = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\mathcal{H}_0 + \frac{1}{\Delta\tau}V_0\right)(t - \tau + \Delta\tau)\right] U(\tau - \Delta\tau), \tag{7.14}$$

ahonnan az $F = U(\tau)$ Floquer-operátor

$$\begin{aligned} F = \lim_{\Delta\tau \to 0} \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\mathcal{H}_0 + \frac{1}{\Delta\tau}V_0\right)\Delta\tau\right] \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{H}_0(\tau - \Delta\tau)\right) = \\ = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V_0\right) \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathcal{H}_0 \tau\right). \end{aligned} \tag{7.15}$$

Szimmetria szempontok alapján három esetet különböztetünk meg.

a) Floquet rendszerekre, ha van időtükrözési szimmetria és nincs spin-pálya kölcsönhatás, a Floquet-operátor mátrixa szimmetrikus.

b) Amennyiben az időtükrözési szimmetria mellett van spin-pálya kölcsönhatás is, akkor a Floquet-operátor mátrixa önduális, azaz $F^R = Z F^T Z^{-1} = F$.

c) Ha nincs időtükrözési szimmetria és spin-pálya kölcsönhatás sem, akkor F-ről csak annyit tudunk, hogy unitér.

Új sokaságokat vezethetünk be. Ehhez olyan transzformációkat kell keresnünk, amelyek megőrzik a mátrixok fenti tulajdonságát. Az ezeknek megfelelő transzformációk (U, V unitér):

a) S szimmetrikus marad, ha

$$S' = USU^T. \tag{7.16}$$

Azon ortogonális mátrixokból álló sokaságot, amely invariáns marad ezen transzformációra, cirkuláris ortogonális sokaságnak (COE) hívjuk.

b) S önduális marad, ha

$$S' = USU^R. \tag{7.17}$$

Azon önduális mátrixokból álló sokaságot, amely invariáns marad ezen transzformációra, cirkuláris szimplektikus sokaságnak (CSE) hívjuk.

c) S unitér marad, ha

$$S' = USV^T. \tag{7.18}$$

Azon unitér mátrixokból álló sokaságot, amely invariáns marad ezen transzformációra, cirkuláris unitér sokaságnak (CUE) hívjuk.

A cirkuláris elnevezés oka: F sajátértékei a komplex sík egységnyi sugarú körén helyezkednek el.

Belátható, hogy a sajátfázisok együttes eloszlása

$$\begin{aligned} P(\phi_1, ..., \phi_n) \sim \prod_{n>m} \left| \mathrm{e}^{\phi_n} - \mathrm{e}^{\phi_m} \right|^{\nu}, \\ \text{COE esetén } \nu = 1, \\ \text{CUE esetén } \nu = 2, \\ \text{CSE esetén } \nu = 4. \end{aligned} \tag{7.19}$$