

从量子谱到经典轨道: 矩形腔中的弹子球

陆 军 杜孟利

(中国科学院理论物理研究所, 北京 100080)
(2003 年 7 月 18 日收到, 2003 年 12 月 16 日收到修改稿)

用体系的本征值和本征波函数定义一种新的量子谱函数, 这种量子谱函数的傅里叶变换包含了体系从一个给定点到另一个给定点的许多经典轨道的信息. 以二维矩形腔中的弹子球运动体系为例的初步研究验证了这一结论.

关键词: 经典-量子对应, 半经典物理

PACC: 0365S

1. 引 言

自从 Gutzwiller^[1,2]提出态密度的周期轨道理论以来, 对可积和混沌体系运动行为的经典力学与量子力学之间关系的研究就一直延续不断^[2-4]. 这种研究极大地丰富了我们对于混沌运动的理解, 对有些问题, 这些研究结果已成为理解新的物理现象的必不可少的工具. 例如, 在研究磁场中原子的高激发态的吸收谱时, 闭合轨道理论^[5-7]揭示出了吸收谱随能量变化具有特定的周期, 而这些周期与体系的闭合轨道对应, 从而成功地解释了困扰原子物理学 10 多年的准朗道振荡现象, 并引发了一系列研究原子分子在外场中运动的理论和实验^[4,8,9], 这些研究现已发展成“回归谱学”(recurrence spectroscopy).

本文将提出一种新的经典-量子对应. 我们将定义一个量子谱函数, 并以二维矩形腔中的弹子球运动为例, 定量地计算所定义的量子谱函数. 我们将揭示新量子谱函数与经典轨道之间的对应关系, 这些轨道既不是 Gutzwiller 周期轨道理论中的周期轨道, 也不是 Du 和 Delos 闭合轨道理论中的闭合轨道.

2. 新的量子谱函数

考虑哈密顿为

$$H = \frac{p^2}{2} + V(q) \quad (1)$$

的多维体系. 设能量本征值为 E_n , n 为量子数, 对应 E_n 的本征波函数记为 ψ_n . 设 A 和 B 为给定的两个

空间坐标点, 我们定义新的量子谱函数为

$$\rho_{AB}(E) \equiv \sum_n \psi_n^*(A) \psi_n(B) \chi(E - E_n). \quad (2)$$

与闭合轨道理论^[5-7]类似的推导表明, $\rho_{AB}(E)$ 可以写成

$$\rho_{AB}(E) = \rho_{AB}^0(E) + \sum_i C_i \sin(S_i + \varphi_i). \quad (3)$$

方程(3)中包含了一个背景项和许多正弦振荡项求和, 求和包含了所有从 A 到 B 的经典允许的轨道. 其中振幅 C_i 与轨道的稳定性有关, 作用量 $S_i = \int_A^B p dq$ 是沿轨道的积分; φ_i 是相位, 包括 Maslov 相位修正. 由于方程(3)的推导较长, 限于篇幅, 我们将另文给出. 但应该指出的是, 方程(3)给出了量子谱(2)式与经典轨道之间的联系, 下面将用例子来说明方程(3)的用处.

3. 二维矩形腔的新量子谱

下面的推导取自然单位. 考虑一个单位质量的弹子球在二维矩形腔中的运动, 势能可表示成如下形式:

$$V(x, y) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \quad 0 < y < b, \\ \infty, & \text{其他区域.} \end{cases} \quad (4)$$

定态薛定谔方程为

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) = E \psi(x, y). \quad (5)$$

用分离变量法得到方程(5)的能级为

$$E_{mn} = \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{m^2}{a^2} + \frac{n^2}{b^2} \right), \quad m, n = 1, 2, 3, \dots, \quad (6)$$

相应的本征波函数为

$$\psi_{mn}(x, y) = \sqrt{\frac{2}{ab}} \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right). \quad (7)$$

设 $A(x_1, y_1), B(x_2, y_2)$ 是二维矩形腔中不在边界上的任意两个点, 则新的量子谱函数为

$$\rho_{AB}(E) = \sum_{mn} \psi_{mn}^*(x_1, y_1) \psi_{mn}(x_2, y_2) \delta(E - E_{mn}). \quad (8)$$

现在我们用傅里叶变换证实新量子谱函数方程 (8) 包含从 A 到 B 的经典轨道的信息. 由于弹子球在二维矩形腔中运动的特点^[10, 11], 作用量可写成 $S = kL$ 其中 k 为动量绝对值, L 为轨道长度. 定义傅里叶变换为

$$\tilde{\rho}_{AB}(L) = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \rho_{AB}(E) \exp(ikL) dE, \quad (9)$$

式中 $E = \frac{k^2}{2}$. 将方程 (8) 代入方程 (9) 积分后得到

$$\tilde{\rho}_{AB}(L) = \sum_{mn} \psi_{mn}^*(x_1, y_1) \psi_{mn}(x_2, y_2) \exp(ik_{mn}L), \quad (10)$$

式中 $k_{mn} = \sqrt{2E_{mn}}$. 方程 (10) 中的求和包括能量介于 E_{\min} 和 E_{\max} 之间的所有能级.

对方程 (3) 作同样的傅里叶变换, 并考虑到 kC_i 在积分区间内变化缓慢, 可近似看作常数, 采用旋转波近似, 于是得到

$$\tilde{\rho}_{AB}(L) \approx \tilde{\rho}_{AB}^0(L) + \sum_i \bar{k}_i C_i \left[-\frac{\exp(-i\varphi_i)}{2i} \right] \Delta(L - L_i), \quad (11)$$

其中

$$\Delta(x) \equiv \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \exp(ixk) dk, \quad (12)$$

是一个峰值在 $x = 0$ 处的函数, 而 $\tilde{\rho}_{AB}^0(L) = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \rho_{AB}^0(E) \exp(i\sqrt{2EL}) dE$, \bar{k}_i 是 k 在区间 $[k_{\min}, k_{\max}]$ 上的某种平均值. 由方程 (11) 可以看出, $|\tilde{\rho}_{AB}(L)|^2$ 函数峰的位置应该对应从 A 到 B 的经典轨道的长度.

积分区间的选取首先应该满足傅里叶变换的要求, 即要能分辨出第 i 个轨道对应的峰, 必须有 $(k_{\max} - k_{\min}) \geq \frac{2\pi}{L_i}$. 另一方面, 积分区间不宜过大, 这样振

幅 kC_i 可近似看作常数.

不失一般性, 作为例子, 我们选择如下的计算参数:

$$\begin{aligned} a &= 9\sqrt{5}, & b &= 9.3; \\ x_1 &= 5.1, & y_1 &= 2.3; \\ x_2 &= 9.2, & y_2 &= 4.2. \end{aligned}$$

求和时能量本征值小于 $E_{\max} = 200$ 的所有态都包括在内.

图 1 描绘了由方程 (10) 计算出的量子谱的傅里叶变换 $|\tilde{\rho}_{AB}(L)|^2$ 随自变量 L 变化的情况. 从图 1 中我们可以看到一些明显的峰, 表 1 的第二列给出了这些峰的位置. 在下一节中我们将看到, 每一个这样峰的位置等于一条经典轨道的长度.

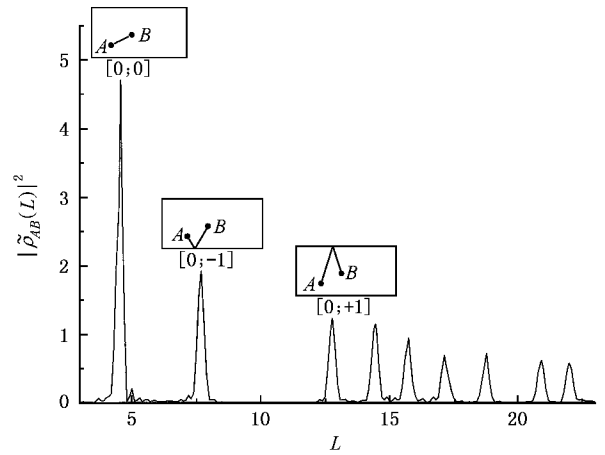


图 1 二维矩形腔中量子谱函数傅里叶变换的模平方 $|\tilde{\rho}_{AB}(L)|^2$ 作为变量 L 的函数(前三个峰上还画出了对应的经典轨道形态)

表 1 二维矩形腔中本文计算得到的量子谱傅里叶变换峰的位置与经典轨道性质对照

编号	量子峰位置	经典轨道形态	经典轨道长度
1	4.57	[0; 0]	4.52
2	7.69	[0; -1]	7.69
3	12.78	[0; +1]	12.78
4	14.46	[-1; 0]	14.43
5	15.74	[-1; -1]	15.71
6	17.14	[0; -2]	17.20
7	18.78	[-1; +1]	18.73
8	20.92	[0; +2]	20.91
9	22.02	[-1; -2]	21.99

4. 量子谱与经典轨道的对应

壁产生碰撞. 我们找到了从 A 到 B 的长度小于 23 的所有经典轨道(见图 2). 下面将对每个轨道的形态进行描述.

弹子球在二维矩形腔中沿直线运动,直到与腔

1) 每个轨道均用方括号([])中的两个整数

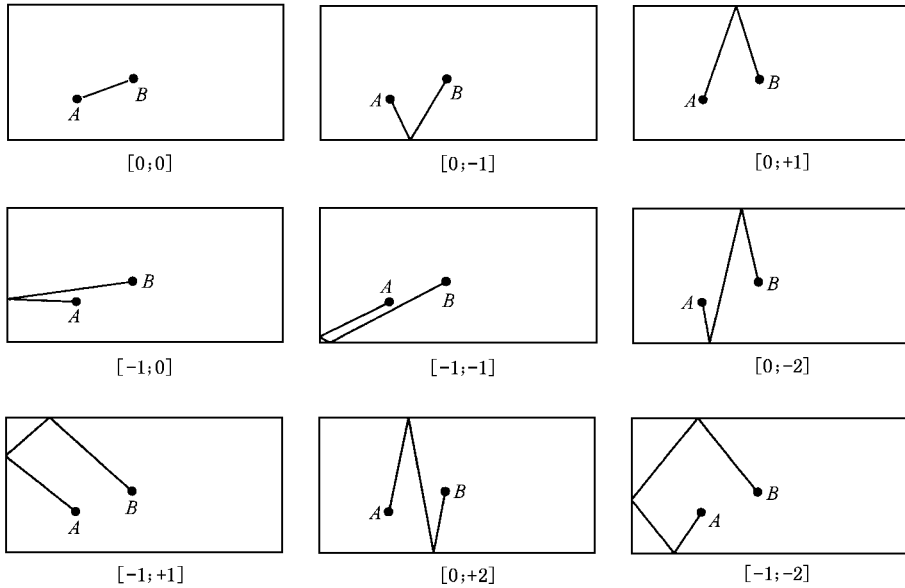


图 2 二维矩形腔中粒子从 A 点到 B 点, 长度小于 23 的经典轨道路径, 这些经典轨道对应图 1 的峰

表示, 并用分号(;)隔开.

2) 前一个整数的绝对值表示该轨道与垂直于 x 轴的两个腔壁的碰撞次数; 而后一个整数的绝对值则表示该轨道与垂直于 y 轴的两个腔壁的碰撞次数.

3) 前一个整数的符号表示弹子球从 A 点出发时的 x 轴方向; “+”表示顺着 x 轴的方向, “-”表示逆着 x 轴的方向; 后一个整数的符号表示弹子球从 A 点出发时的 y 轴方向; “+”表示顺着 y 轴的方向, “-”表示逆着 y 轴的方向.

表 1 中右边两列给出了经典轨道的性质. 我们发现, 弹子球各经典轨道与图 1(量子谱的傅里叶变换)中的各个峰的位置具有一一对应的关系. 由表 1 可以看出, 在误差允许的范围内, 每个经典轨道的长度恰与峰的位置相一致.

5. 讨 论

上述研究证明了二维矩形腔体系中经典轨道与新定义的量子谱的定量对应关系. 我们看到, 这些轨道既不是周期轨道^[2], 也不是闭合轨道^[5-7], 它们是从 A 点到 B 点的开轨道, 而 A 点和 B 点可任意选取. 应该指出, 虽然上述经典-量子对应的讨论是针对二维矩形腔体系展开的, 但该体系仅仅是用来作为一个简单的例子. 我们相信, 这一经典-量子对应能够应用到更多的体系^[10,11]. 另外还需要指出, 各种形状二维腔弹子球的动力学研究与纳米器件的输运性质密切相关, 因此, 对这些体系的研究具有较高的应用价值^[12-15].

[1] Gutzwiller M C 1971 *J. Math. Phys.* **12** 343
 [2] Gutzwiller M C 1990 *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (New York: Springer-Verlag)
 [3] Percival I C 1977 *Adv. Chem. Phys.* **36** 1
 [4] Kleppner D, Delos J B 2001 *Found. Phys.* **31** 593
 [5] Du M L, Delos J B 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 1731
 [6] Du M L, Delos J B 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1896, 1913
 [7] Du M L 1992 *Physics* **21** 263 (in Chinese) [杜孟利 1992 物理 **21** 263]
 [8] Granger B E, Greene C H 2000 *Phys. Rev. A* **62** 12511
 [9] Matzkin A, Dando P A, Monteiro T S 2002 *Phys. Rev. A* **66** 13410

- [10] Robinett R W 1998 *J. Math. Phys.* **39** 278
- [11] Robinett R W 1999 *Am. J. Phys.* **67** 67
- [12] Marcus C M , Rimberg A J , Westervelt R M *et al* 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 506
- [13] Nöckel J U , Stone A D 1997 *Nature* **385** 45
- [14] Schwieters C D , Alford J A , Delos J B 1996 *Phys. Rev. B* **54** 10652
- [15] Wirtz L , Stampfer C , Rotter S *et al* 2003 *Phys. Rev. E* **67** 16206

From quantum spectra to classical orbits : the rectangular billiards

Lu Jun Du Meng-Li

(*Institute of Theoretical Physics , Chinese Academy of Sciences , Beijing 100080 ,China*)

(Received 18 July 2003 ; revised manuscript received 16 December 2003)

Abstract

A new quantum spectrum function is defined using the eigenvalues and eigenfunctions of the system considered. We study the two-dimensional rectangular billiard , and find that the Fourier transform of the spectrum function reveals the classical orbits from one point to another.

Keywords : classical quantum correspondence , semiclassical physics

PACC : 0365S