

二维椭圆量子台球中的谱分析*

徐学友¹⁾ 张延惠¹⁾ 黄发忠¹⁾ 林圣路^{1)†} 杜孟利²⁾

¹⁾ 山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250014)

²⁾ 中国科学院理论物理研究所, 北京 100080)

(2005 年 1 月 27 日收到, 2005 年 3 月 7 日收到修改稿)

研究了二维椭圆台球中的量子谱和经典轨道之间的对应关系. 为尝试求解没有解析波函数和本征能量又不能分离变量的体系, 采用了定态展开方法 (expansion method for stationary states, 简称 EMSS) 得到尽可能精确的数值解. 这是闭合轨道理论被推广到计算开轨道的情况. 比较了傅里叶变换谱和经典轨道, 发现量子谱的峰位置与经典轨道的长度在可分辨的范围内符合得很好. 这是半经典理论为经典与量子力学的联系提供桥梁作用的又一个例子.

关键词: 椭圆量子台球, 定态展开方法, 闭合轨道理论, 量子谱

PACC: 0365S

1. 引言

近年来, 基于晶体生长和人工刻蚀技术的进步, 纳米技术越来越受到人们的青睐, 并开创了制作纳米器件的新方法^[1]. 通过一个门电压控制电子在这种器件中运动, 使电子被控制在一维或两维的空腔中. 任意形状的二维空腔都可以由半导体异质结构成. 在低温下无论是弹性散射还是非弹性散射, 高质量的异质结的尺度都可以小于电子的平均自由程, 但是要大于电子的费米波长, 当电子通过这样的空腔时, 可以看作是自由运动. 这样的系统称为量子台球^[2]. 微腔输运性质的研究可以采用量子台球作为模型, 并且在研究动力学系统特别是量子混沌中, 这种模型已经被证明是很有意义的^[3]. 我们研究的量子台球中的量子谱函数和经典运动之间的对应关系一直是这几年来人们所关心的问题. 在理论和实验上都有很好的发展前景.

一般的二维量子台球问题是研究台球区域内部存在恒定势场的情况下, 由一点出发的粒子的运动情况. 粒子在边界上是弹性散射, 在两次碰撞之间做直线运动, 由于可以看作是自由粒子, 所以台球区域的形状以及区域内所加的势场决定了粒子的运动是规则的还是混沌的. 在理论上人们已经用周期轨道

理论方法和 Berry 公式作过很多工作^[4-6], 而用闭合轨道理论讨论开轨道情况的研究才刚开始. 如研究了矩形^[7]以及正三角形^[8]量子台球的动力学性质, 这些量子台球有一个共同的性质——都有解析的本征函数和本征值. 本文研究的二维椭圆量子台球体系是一个可积体系^[9], 但是采用数值方法求解. 这里所提供的定态展开方法^[10]具有一定普遍意义, 而数值近似方法可为求解混沌体系提供借鉴.

2. 量子谱及其傅里叶变换

我们考虑单位质量粒子的运动(以下推导中取自然单位 $m = \hbar = 1$), 假设体系的 Hamiltonian 是

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

取椭圆区域为 \mathfrak{R} , 其边界方程为 $x^2 + 4y^2 = 1$,

$$V(q) = \begin{cases} 0 & \text{如果 } q \in \mathfrak{R}, \\ \infty & \text{如果 } q \notin \mathfrak{R}. \end{cases} \quad (2)$$

对应的定态 Schrödinger 方程是

$$H\psi_n(q) = \left[\frac{p^2}{2} + V(q) \right] \psi_n(q) = E_n \psi_n(q). \quad (3)$$

本征能量和本征波函数分别为 E_n 和 ψ_n , n 是标记量子态的指标, 由于势能在 \mathfrak{R} 外为 ∞ , 所以 $\psi_n(q)$ 在边界上必须满足 Dirichlet 边界条件 $\psi(q)|_{q \in \Gamma} = 0$.

* 国家自然科学基金(批准号: 10374061, 90403028)资助的课题.

† E-mail: sllin@sdu.edu.cn

本文对于量子谱的计算应用近来提出的新量子谱函数^[7], 我们假设在坐标表象中的 A 和 B 两点, 量子谱函数定义为

$$\rho_{AB} = \sum_n \psi_n^*(A) \psi_n(B) \chi(E - E_n). \quad (4)$$

类似于闭合轨道^[11, 12]的平均振子强度密度的推导, 上面的量子谱函数可以写成一个平滑背景项与一些正弦振荡项求和的叠加

$$\rho_{AB}(E) = \rho_{AB}^0(E) + \sum_i C_i \sin(S_i + \varphi_i), \quad (5)$$

其中, 右边第 1 项是一个平滑背景项, 第 2 项是一些正弦振荡项的求和, 求和包含了从 A 到 B 的所有允许的经典轨道, 振幅 C_i 是与轨道的稳定性有关的量, S_i 是经典作用量 $S_i = \int_A^B p dq$ 积分沿经典轨道进行, φ_i 是相位, 包含 Maslov 相位修正.

体系的经典作用量 S_i 表为 $S = KL$, 其中 $K = \sqrt{2E}$, L 是经典轨道的长度. 量子谱的傅里叶变换是^[7, 8]

$$\tilde{\rho}_{AB}(L) = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \rho_{AB}(E) \exp(iKL) dE, \quad (6)$$

其中, E_{\min} 和 E_{\max} 是选定能量的上下限, 这两个值的选定必须要满足变换的精度要求, 由此我们得到实际计算傅里叶变换的另一种表达形式

$$\tilde{\rho}_{AB}(L) = \sum_m \phi_m^*(x_1, y_1) \phi_m(x_2, y_2) \exp(iK_m L). \quad (7)$$

为了与经典结果比较, 对方程 (5) 作同样的傅里叶变换, 采用旋转波近似, 得到

$$\tilde{\rho}_{AB}(L) \approx \tilde{\rho}_{AB}^0(L) + \sum_i \bar{k}_i C_i \left[-\frac{\exp(-i\varphi_i)}{2i} \right] \times \Delta(L - L_i), \quad (8)$$

其中

$$\Delta(x) \equiv \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \exp(ixk) dk \quad (9)$$

是一个峰值在 $x = 0$ 处的函数, 而 $\tilde{\rho}_{AB}^0(L) = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \tilde{\rho}_{AB}^0(E) \exp(i\sqrt{2EL}) dE$, \bar{k}_i 是 k 在区间 $[k_{\min}, k_{\max}]$ 上的平均值.

3. 定态展开方法

我们采用 EMSS 方法^[10]进行近似处理, 取一包围椭圆区域的矩形作为势能从零到无穷大的过渡区域, 则势能 $V(q)$ 近似为

$$\tilde{V}(q) = \begin{cases} 0 & q \in \text{I} \\ V_0 & q \in \text{II} \\ \infty & q \in \text{III} \end{cases}, \quad (10)$$

其中, V_0 是一个足够大的常数 (一般取体系本征值最大值的 10 倍, 即 $V_0 = 10E_{\max}$), 区域 I, II, III 在图 1 中已经标出. 矩形的边长分别为 $a = 2$ 和 $b = 1$, 在区域 II 中用一个足够大但是有限的 V_0 , 因为 $\lim_{V_0 \rightarrow \infty} \tilde{V}(q) = V(q)$ 所以用 (10) 式代替原来的椭圆无限深势阱 (2) 是合理的. 当然波函数同样要满足边界条件 $\psi(q)|_{q \in \bar{\Gamma}} = 0$, 其中 $\bar{\Gamma}$ 是矩形的边界, 作这样的近似后对于体系有两方面的影响:

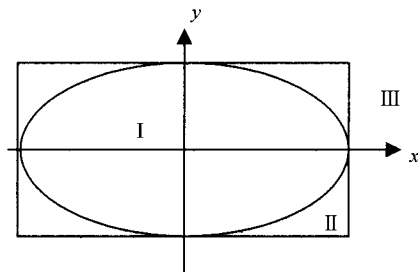


图 1 I 区——二维椭圆量子台球, 势为零; II 区——所加的矩形和椭圆边界之间的区域, 势 V_0 ; III 区——势为无穷大

1) 对应的定态波函数在 II 区已不再为零, 但是对于 $E_n \ll V_0$, 其值非常小可以忽略; 2) 波函数 $\psi_n(q)$ 可以按定态展开

$$\psi_n(q) = \sum_m C_m^n \phi_m(q). \quad (11)$$

其中, C_m^n 是待定展开系数, $\phi_m(q)$ 是相应的矩形量子台球中的能量本征波函数

$$\begin{aligned} \phi_m(q) &\equiv \phi_{m_1, m_2}(x, y) \\ &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a} m_1 x\right) \sqrt{\frac{2}{b}} \sin\left(\frac{\pi}{b} m_2 y\right) \end{aligned} \quad (12)$$

$\phi_m(q)$ 是正交归一的波函数, x 和 y 是迪卡尔坐标, $m = (m_1, m_2)$ 是一对正整数^[10].

$$\int dq \phi_n(q) \phi_m(q) = \delta_{nm}, \quad (13)$$

其中, δ_{nm} 是 Kronecker 符号. 将 (11) 代入 Schrödinger 方程 (3), 并用 $\tilde{V}(q)$ 代替 $V(q)$, 然后左乘 $\phi_n(q)$ 得到

$$\sum_m (H_{nm} - E\delta_{nm}) C_m^n = 0. \quad (14)$$

我们定义 Hamiltonian 矩阵元

$$H_{nm} = \int d^2 q \phi_n(q) H \phi_m(q), \quad (15)$$

利用 $H = \frac{p^2}{2} + \tilde{V}(q)$ 我们可以计算出矩阵元

$$H_{nm} = 2\pi^2 \left[\left(\frac{m_1}{a} \right)^2 + \left(\frac{m_2}{b} \right)^2 \right] \delta_{nm} + V_0 v_{nm}, \quad (16)$$

$1 \leq m \leq M, 1 \leq n \leq N.$

这里我们对矩阵采用双下标表示 $m = (m_1 - 1)M + n_1, n = (m_2 - 1)N + n_2,$

$$v_{nm} = \int_{\Pi} d^2 q \phi_n(q) \phi_m^*(q), \quad (17)$$

这个积分是对整个区域 Π 进行.

系统的能级 E_n 由下面的方程确定

$$\det | H_{nm} - E \delta_{nm} | = 0. \quad (18)$$

对应的能量本征值是一些不连续的值 $E_n, n = 1, 2, 3, \dots$ 将这些能量本征值代入方程(14)中, 得到波函数的待定展开系数 C_m^n , 于是我们就得到了系统的波函数.

4. 计算结果和讨论

在计算中我们选取了以下参数:

$$a = 2, b = 1, E_{\max} = 500000, V_0 = 10E_{\max}, \quad (19.1)$$

$$N = 143, M = 143, \quad (19.2)$$

$$x_1 = -0.5, y_1 = 0.2, \quad (19.3)$$

$$x_2 = 0.5, y_2 = 0.3. \quad (19.4)$$

在图 2 中, 我们给出的是傅里叶变换谱中的长度较短的一些轨道, 可以看到在这个图中有一些峰, 每个峰分别对应于一条或几条经典轨道, 同时还发现量子谱并非线状, 而是出现了弥散现象.

在图中已标出量子峰位置与从 A 点到 B 点的经典轨道长度之间的对应关系. 考虑在椭圆势阱中

经典自由粒子从 A 到 B 所有可能的运动, 它或者直接到达 B 点, 或者与椭圆的壁相碰多次后到达 B 点. 粒子在椭圆中运动时, 在碰到壁之前总是沿直线运动, 与壁相碰则要满足反射定理, 即碰撞前的入射角等于碰撞后的反射角 (如图 3 所示).

表 1 给出了一部分具体的量子峰位置和经典轨道长度 L_i 的对应关系, $L_i (i = 1, 2, 3, \dots)$ 表示从 A 到 B 的第 i 条经典轨道总长度. 图 2 中的轨道 ① 对应于图 4 中经典的轨道 L_1 ; ② 对应 L_2, L_3, L_4 和 L_5 ; ③ 对应 L_6 ; ④ 对应 L_7 和 L_8 ; ⑤ 对应 L_9, L_{10} 和 L_{11} ; ⑥ 对应 L_{12} 和 L_{13} ; ⑦ 对应 L_{14} ; ⑧ 对应 L_{15} 和 L_{16} , 剩余轨道限于篇幅没有给出对应.

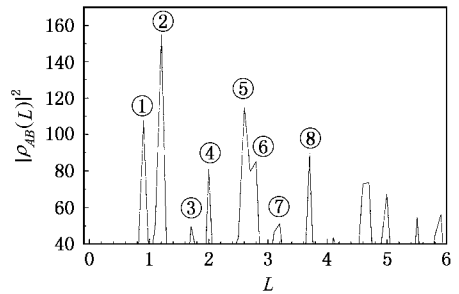


图 2 量子谱函数傅里叶变换的模平方作为变量 L 的函数

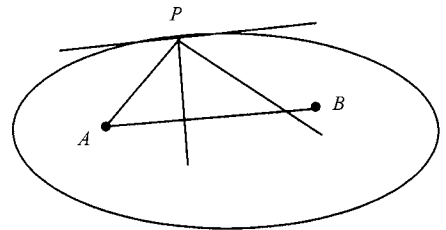


图 3 粒子在椭圆量子台球中的运动

表 1 量子峰位置与经典轨道的对应

	1	2	3	4	5	6	7	8
量子峰位置	0.930	1.190	1.190	1.190	1.190	1.750	2.060	2.060
经典轨道长度	1.005	1.134	1.166	1.205	1.235	1.820	2.080	2.099
	9	10	11	12	13	14	15	16
量子峰位置	2.590	2.590	2.590	2.810	2.810	3.160	3.750	3.750
经典轨道长度	2.534	2.541	2.562	2.871	2.910	3.149	3.784	3.836



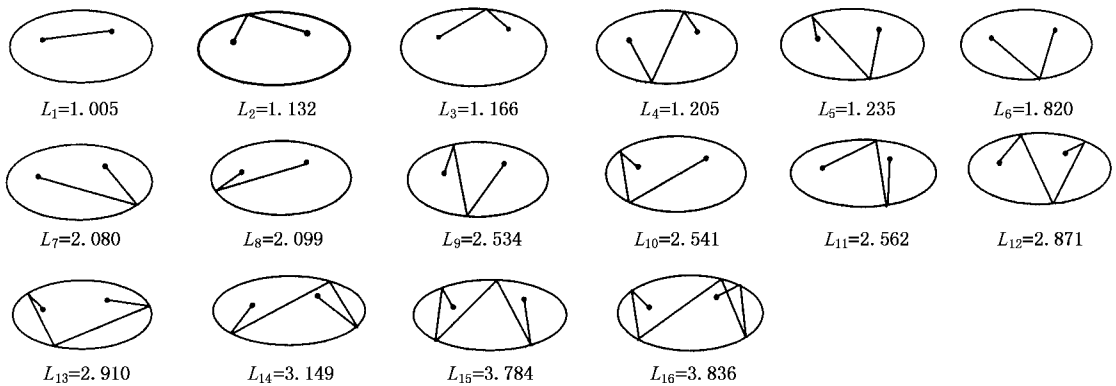


图 4 从 A 点到 B 点的长度较短的一部分经典轨道

本文研究了二维椭圆量子台球中的量子波函数与经典轨道之间的对应关系,发现量子谱出现了弥散现象,这是由于我们采用 EMSS 时在椭圆的外面用了一个有限的势作近似,原来的硬壁就变成了软壁.从量子力学的角度看,量子隧穿效应导致振幅 C_i 的衰减,而散射导致了出射波的发散;另一方面,从经典运动角度看,当粒子与壁相碰时与壁交换能量,粒子与边界碰撞的次数越多,则能量衰减越严重.以上两方面都说明,运用有限的 V_0 代替刚性壁,反射定理并不严格成立,其影响表现在压低了峰

的高度,并增大了峰的宽度,所有这些影响都产生了弥散现象,但在可分辨的范围内不影响傅里叶量子峰位置与经典轨道长度的对应关系.我们可以通过增大 V_0 或定态展开基函数的数目以提高计算精度.EMSS 提供了一种解决不规则量子台球问题的方法,特别是一些没有解析本征函数和本征值的台球体系.预期这种方法可以用于求解体育场型体系的混沌谱以及对它的识别,也可用于微腔中电子的输运性质的研究中.

- [1] Bout F A 1993 *Phys. Rep.* **234** 73
- [2] Christensson L, Linke H and Omling P 1998 *Phys. Rev. B* **57** 12306
- [3] Gutzwiller M C 1990 *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (New York: Springer)
- [4] Richens P J and Berry M V 1981 *Phys. D* **2** 495
- [5] Wang P J and Wu G Z 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2545 (in Chinese)
[王培杰、吴国祯 2005 物理学报 **54** 2545]
- [6] Song X H, Zhang Q J, Xue Y L et al 2002 *Chin. Phys.* **11** 656
- [7] Lu J and Du Meng-Li 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2450 (in Chinese)
[陆 军、杜孟利 2004 物理学报 **53** 2450]
- [8] Lin S L, Gao F, Hong Z P et al 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 9
- [9] Poet D A and Poet R R W 2000 *Phys. Lett. A* **271** 277
- [10] Kaufman D L and Schulten K 1999 *Am. J. Phys.* **67** 133
- [11] Du M L and Delos J B 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1896
Du M L and Delos J B 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1913
- [12] Lin S L, Zhang Q J, Zhao K et al 2002 *Chin. Phys. Lett.* **19** 29

Spectra analysis of the two-dimensional elliptic billiards^{*}

Xu Xue-You¹⁾ Zhang Yan-Hui¹⁾ Huang Fa-Zhong¹⁾ Lin Sheng-Lu^{1)†} Du Meng-Li²⁾

¹⁾(College of Physics and Electronics , Shandong Normal University , Jinan 250014 ,China)

²⁾(Institute of Theoretical Physics , Chinese Academy of Sciences , Beijing 100080 ,China)

(Received 27 January 2005 ; revised manuscript received 7 March 2005)

Abstract

The correspondence between the quantum spectra and the classical orbits of the two-dimensional elliptic billiards is investigated. In order to study systems without analytic solutions in the future , an expansion method for stationary states (EMSS) to get highly accurate numerical solutions is applied and tested. The closed-orbit theory was extended to the open orbit case. By comparing the Fourier-transformed spectra with the classical orbits , we find that the peak positions in the quantum spectra match with the lengths of the classical orbits with small numerical differences. This is another example showing that semiclassical method provides a bridge between quantum and classical mechanics.

Keywords : quantum elliptic billiard , closed-orbit theory , expansion method for stationary states , quantum spectra

PACC : 0365S

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10374061 and 90403028).

[†] E-mail : sllin@sdu.edu.cn