

从量子谱到经典轨道 :圆形腔中的弹子球*

张业兵

(淄博师范高等专科学校 物理系,山东 淄博 255100)

摘要 :用半经典的方法来研究粒子经典运动已成为处理某些量子问题必不可少的工具。周期轨道理论已经成为人们研究定态体系的量子谱和所对应粒子经典运动的关系的主要工具。本文应用周期轨道理论,运用量子谱函数,这种量子谱函数的傅立叶变换包含了体系内许多经典轨道的信息。以二维无限深圆环势阱为例,利用它们的能量本征值和本征函数,用态密度公式计算周期轨道的情况下,量子能态密度的傅立叶变换 $\rho(L)$ 。在 $|\rho(L)|^2$ 随 L 变化的函数图像中得到了一系列的峰,量子峰的位置与用经典方法得到的轨道长度符合得很好,这不但证明经典行为和量子行为具有很好的对应,同时也显示这种半经典的方法是连接经典与量子的一座很好的桥梁。

关键词 :周期轨道理论;经典-量子对应;傅立叶变换谱;量子谱函数

中图分类号 :O562.3

文献标识码 :A

文章编号 :1672-6693(2011)01-0060-04

自量子力学诞生以来,量子体系和经典体系的对应关系一直是人们感兴趣的问题。从 Gutzwiller 提出态密度的周期轨道理论以来^[1],对可积和混沌体系运动行为的经典力学和量子力学之间关系的研究就一直延续不断。用半经典的方法来研究粒子的经典运动已成为处理某些量子问题必不可少的工具。近年来,纳米器件、微腔结构及其输运问题^[2]已经成为人们研究的前沿课题。而量子台球可以作为研究它们的理想模型,无论在可积或量子混沌系统中,对理论和实验都具有很好的指导作用。人们应用周期轨道理论已经研究了许多体系中一个粒子量子化的本征值谱和经典轨道之间的对应关系^[3-5]。

本文应用半经典周期轨道理论的思想,通过定义量子谱函数,研究了量子台球在二维圆形无限深势阱体系中的经典轨道与量子谱的关系,对于圆形体系无限深势阱体系,弹子球运动的本征波函数是整数阶的贝塞尔函数,利用边界条件,可以得到精确的数值解。用几何方法找出了经典轨道的信息(形状、轨道长度),并把这些轨道和体系的傅立叶变换量子谱的峰值位置一一对照。

1 量子谱函数

考虑一个质量为 μ 的粒子(为了避免与大家熟

悉的量子数相混淆,此处用 μ 来表示粒子的质量),假设体系的 Hamiltonian 是

$$H = \frac{P^2}{2\mu} + V(r)$$

在无限深圆形势阱中,其半径为 R ,对应的势能可表示成

$$V(r, \theta) = V(r) = \begin{cases} 0 & r < R \\ \infty & r \geq R \end{cases}$$

对应的定态薛定谔方程为

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

其中,本征能量和本征函数分别为 E_n 和 ψ_n , n 为标记量子态量子数。

在周期轨道理论中,最主要的物理量是量子能态密度

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n) \quad (1)$$

(1)式中的求和包括所有的定态能量本征值。周期轨道理论的一个主要结论是,量子能态密度可以写成半经典形式,近似地写成

$$\rho(E) = \rho_0(E) + \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{\gamma} \rho_{\gamma,p} \cos \left[p \left(\frac{S_{\gamma}(E)}{\hbar} - \phi_r \right) \right] \quad (2)$$

* 收稿日期 2010-05-18

资助项目 :国家自然科学基金(No. 90403028)

作者简介 :张业兵,男,讲师,硕士研究生,研究方向为强场动力学。

(2)式中的第一项 $\rho_0(E)$ 是一个平滑的背景项,随能量 E 的变化 $\rho_0(E)$ 变化非常缓慢,因此这一项对态密度的贡献为常数。第二项是最关心的振荡项, $S_\gamma(E)$ 为轨道的经典作用量,对应着所有的基本轨道 ($\gamma = 1, \dots, \infty$)。 p 表示基本轨道的多次回归 ($p = 1, \dots, \infty$)。 ϕ_r 是在路径积分过程中引入的相位修正。

对于弹子球体系来说,也就是一个在任意形状的无限深势阱内部运动的自由粒子系统,假设势阱的面积为 A , 势阱的周长为 L , 在边界上体系的波函数 $\psi = 0$, 这样平滑的背景项 $\rho_0(E)$ 就可以表述为

$$\rho_0(E) = \frac{A}{4\pi} \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right) - \frac{L}{8\pi} \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2 E}} \rightarrow \frac{A}{4\pi} - \frac{L}{8\pi} \frac{1}{\sqrt{E}}$$

(为了方便,计算中取 $\frac{\hbar^2}{2\mu} = 1$)。Weyl 在研究黑体辐射问题时对这一项进行了系统的研究,因此通常称这一项为 Weyl 项。

利用(1)式,在动量空间中,忽略一些不重要的因素,可以得到相等的态密度

$$\rho(k) = \sum_n \delta(k - k_n)$$

与(2)式相应的表示,在动量空间中就可以写成

$$\rho(k) = \rho_0(k) + \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{\gamma} \rho_{\gamma,p} \cos [p(kL_\gamma - \phi_\gamma)]$$

上式两边同时乘以 e^{ikL} , 并对整个动量空间积分,可以得到离散的能量项

$$\rho(L) = \sum_{n=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(k - k_n) e^{ikL} dk = \sum_{n=1}^{\infty} e^{ik_n L}$$

对于半经典的振荡项,经过傅立叶变换之后,得到

$$\rho(L) = \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{\gamma} \rho_{\gamma,p} \delta(L - pL_\gamma) \quad (3)$$

从(3)式可以看到在 δ 函数的峰值出现的地方,对应着经典轨道 $L = pL_\gamma$ 的长度。在(3)式中,因为计算量的限制,不可能取无穷多的数值,只能取有限的数值来计算。因此(3)写成

$$\rho_N(L) = \sum_{n=1}^N e^{ik_n L}$$

2 二维圆形弹子球体系的量子表达

一个质量为 μ 的弹子球在两维圆形体系中运动,在极坐标系下定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \psi(r, \theta) = E \psi(r, \theta)$$

假设分离变量解的形式是 $\psi(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta)$, 由此得到角向方程和径向方程分别为

$$\frac{d^2 \Theta_m(\theta)}{d\theta^2} = -m^2 \Theta_m(\theta)$$

$$\frac{R(r)}{r^2} + \frac{1}{r} \frac{dR(r)}{dr} - \frac{m^2}{r^2} R(r) = -k^2 R(r)$$

此处 $k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$, m^2 是待定的分离变量常数。归一化的角向方程解的形式为

$$\Theta_{(m)}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\theta} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

角动量本征的值为 $L = m\hbar$, 其中 $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ 是角动量量子数。“+”和“-”分别表示弹子球沿逆时针和顺时针运动。令 $z = kr$, 这样径向方程变成

$$\frac{d^2 R'(z)}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dR'(z)}{dz} + \left(1 - \frac{m^2}{z^2} \right) R'(z) = 0$$

这是贝塞尔方程,取整数阶贝塞尔函数作为方程的解。

由圆的边界条件 $J_m(kR) = 0$, 可以得到能量本征值是

$$E_{(m, n_r)} = \frac{\hbar^2 k_{(m, n_r)}^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} [a_{(m, n_r)}]^2$$

$a_{(m, n_r)}$ 是正则贝塞尔函数 $J_m(z)$ 的第 n_r 个零点。为了更加充分地说明问题,给出了 m 所对应的前几个零点值

$m = 0 :$	2.40	5.52	8.65	...
$m = 1 :$	3.83	7.02	10.17	...
$m = 2 :$	5.14	8.41
$m = 3 :$	6.38	9.76

由此得到径向波函数的归一化形式是

$$J_{(m, n_r)}(kr) = N_{(m, n_r)} J_m(kr)$$

此处,

$$[N_{(m, n_r)}]^2 \int_0^R [J_m(kr)]^2 r dr = 1, k = \frac{a_{(m, n_r)}}{R}$$

由此就可以得到圆形势阱中弹子球的能量本征波函数是

$$\psi(r, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\theta} J_{(m, n_r)}(kr)$$

3 二维圆形弹子球体系运动的经典表达

一个质量为 μ 的弹子球,在二维无限深圆环体

系势阱中运动, 设半径为 R , 弹子球与外壁发生碰撞时遵循反射定律, 则经典的周期轨道的长度可以用 n, p, q 3 个整数表示, 其中 $n = 1, 2, 3, \dots$ 为回归的次数, $p = 1, 2, 3, \dots$ 为粒子与圆壁碰撞的次数, $q = 1, 2, 3, \dots$ 为粒子第一次回到初始点粒子转的圈数, 要求 $p \geq 2q$ 。经典周期轨道的长度可以表示成

$$L_1(n, p, q) = n[2pR \sin(\frac{\pi q}{p})]$$

如果 q 不变, p 无限增大, 当 $p \rightarrow \infty$ 时, 运动接近圆周运动, 当 $q = 1$ 时, 其轨道的总长度就是圆的周长, $q \neq 1$, 其轨道的总长度就是圆的周长整数倍即 $2\pi R, 4\pi R, 6\pi R, \dots$

$$L_1(n, p \rightarrow \infty, q) = n2\pi R$$

特殊情况, 粒子由圆上的某点出发, 经圆壁反射后直接按原路径返回到出发点(对应着 $[p, q] = [2, 1]$) 以及这种方式的多次回归情况, 这种情况轨道的长度为 $L = 2nR$ 。

4 圆形体系量子谱的对比

令 $E_{\max} = 18\ 000$, 取能量最低的 1 000 个 a_{m, n_r} 的值来描述圆形势阱中弹子球的随 L 的变化情况, 并尽量考虑到了 m 的所有取值。在 $3.2 \leq L \leq 10$ 区间, 圆形的量子谱见图 1。

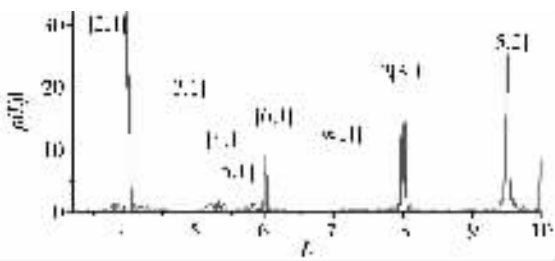


图 1 圆形体系的量子谱与经典轨道的对应

弹子球在二维圆形中从某点出发沿直线运动, 并与腔壁产生碰撞, 碰撞的过程符合反射定律, 最后又回到原来位置。圆形弹子球体系的部分经典轨道见图 2, 圆形弹子球体系中的量子谱的傅立叶变换谱峰的位置与经典轨道的对照见表 1。

通过图 1、2 和表 1, 可以看出把经典轨道与傅立叶变换后的量子谱进行对照, 可以清楚地看到二维圆形弹子球体系中的经典轨道与傅立叶变换后的量子谱中的各个峰有一一对应的关系。表 1 给出了

量子谱的傅立叶变换的峰的位置与经典轨道长度的对照, 发现在误差允许的范围内, 每条轨道的长度与峰的位置基本一致。体系的量子行为与经典行为取得了很好的对应, 同时进一步证明了周期轨道理论的正确性。

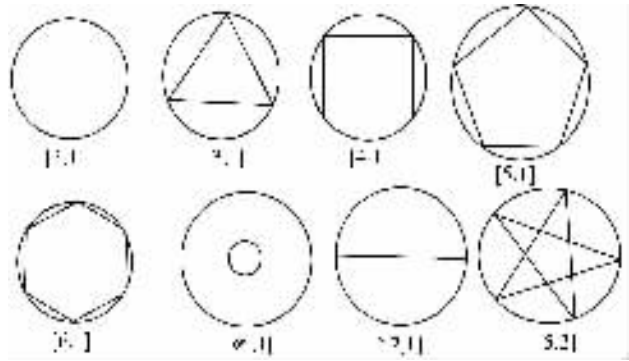


图 2 圆形弹子球的部分经典轨道

表 1 圆形弹子球体系中的量子谱的傅立叶变换谱峰的位置与经典轨道的对照

编号	量子峰的位置	经典轨道的形态	经典轨道的长度
1	4.05	[2, 1]	4.00
2	5.21	[3, 1]	5.20
3	5.69	[4, 1]	5.66
4	5.85	[5, 1]	5.88
5	6.02	[6, 1]	6.00
6	6.31	[∞, 1]	6.28
7	7.97	[2, 2, 1]	8.00
8	9.50	[5, 2]	9.51

5 结论

本文利用分离变量法求出了二维无限深势阱圆形弹子球体系的本征值和本征函数, 给出精确的数值解。通过比较它们的傅立叶变换谱和经典轨道, 结果发现量子谱的峰位置与经典轨道的长度在误差允许的范围内符合得很好, 为了便于理解, 分别画出了量子谱的图像、经典运动的轨道图像, 列出了二者的对应表, 这些特点可以通过这些表和图清晰、直观地看出来。从而证明了周期轨道理论的正确性, 也可以看出半经典理论为经典和量子力学提供了很好的桥梁作用。这种理论可以用来解释光谱学中强电磁场中的原子结构, 为微腔运输中的相关技术, 半导

体微结构设计的连接提供很好的理论模型,当前已经有人对不同体系的二维弹子球系统做过一些研究^[6-8]。由于半导体器件中电子的输运性质依赖于腔体的形状,对二维或是三维弹子球系统的动力学性质的研究,在未来还有较高的应用价值。

参考文献:

- [1] Gutzwiller M C. Periodic orbits and classical quantization conditions[J]. J Math Phys ,1971 ,12 343-345.
 [2] Blomquist T. Time-resolved dynamics of electron wave packets in chaotic and regular quantum billiards with leads [J]. Phys Rev(E) 2002 66 026217.
 [3] Robinett R W. Visualizing classical periodic orbit from the quantum energy spectrum via the fourier transform simple infinite well examples[J]. Am J Phys ,1997 ,65 :1167-

1175.

- [4] Robinett R W. Visualizing the solutions for the circular infinite well in quantum and classical mechanics[J]. Am J Phys ,1996 64 440-445.
 [5] Robinett R W. Periodic orbit theory analysis fo the circular disk or annular billiard nonclassical effects and the distribution of energy eigenvalues[J]. Am J Phys ,1999 67 67-77.
 [6] Lin S L ,Gao F. Quantum spectra and classical orbits in two-dimensional equilateral triangular billiards[J]. Chin Phys Lett 2005 22 9-11.
 [7] Zhang Y H ,Zhang L Q ,Xu X Y ,et al. The quantum spectra analysis of the circular billiards in well[J]. Chin Phys , 2005 ,15(3) 502-506.
 [8] 陆军 杜孟利. 从量子谱到经典轨道 矩形腔中的弹子球 [J]. 物理学报 2004 53(8) 2450-2453.

From Quantum Spectra to Classical Orbits : the Circular Billiards Systems

ZHANG Ye-bing

(Dept. of Physics , Zibo Normal College , Zibo Shandong 255100 , China)

Abstract : The semi-classical method has become a necessary instrument to study the classical movement of the particle. Periodic orbit theory is rapidly becoming one of most useful semi-classical tools which can be used to make direct connections between the quantized energy eigenvalues of a bound state and the classical motions for the corresponding point particle. We use a quantum spectral function which contain rich information of classical orbits in well. We study the correspondence between quantum spectra and classical orbits in the circular. Two-dimensional billiard systems have provided easily visualization examples relevant for both types of analyses. As a simple example of the application to a billiard or infinite well system of Periodic orbit theory , we compute the Fourier transform ($\rho(L)$) of the quantum mechanical energy level density of two-dimensional circular billiard systems. The resulting peaks in plots of $|\rho(L)|^2$ versus L are compared to the lengths of the classical trajectories in these geometries. The locations of peaks in $\rho(L)$ agree with the lengths of classical orbits perfectly , which testifies the correspondence of quantum mechanics and classical mechanics. This examples show evidently that semi-classical methods provides a bridge between quantum and classical mechanics.

Key words : the periodic orbits theory ; classical-quantum correspondene ; Fourier-transformed spectra ; quantum spectra function

(责任编辑 欧红叶)