

ТОНКАЯ СТРУКТУРА ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Е.Б.Богомольный

Показано, что волновые функции квантовых систем, эргодических в классическом пределе, при $\hbar \rightarrow 0$ имеют повышенную плотность вблизи неустойчивых периодических траекторий. Усредненный квадрат волновой функции в окрестности периодической траектории выражен через элементы матрицы монодромии этой траектории. Результаты сравнены с численными расчетами волновых функций для бильярда "стадион".

1. Настоящая статья посвящена исследованию структуры квазиклассических волновых функций для неинтегрируемых квантовых систем. Неинтегрируемость здесь означает, что часть классических траекторий данной задачи не лежит на инвариантных торах. В этом случае обычные правила квазиклассического квантования типа правил Бора – Зоммерфельда не применимы¹ и свойства волновых функций и уровней энергии в пределе $\hbar \rightarrow 0$ до сих пор изучены недостаточно.

Ниже показано, что волновые функции подобных систем имеют повышенную плотность вблизи неустойчивых периодических траекторий соответствующей классической задачи. Усредненный квадрат волновых функций в окрестности данной периодической траектории выражается через элементы матрицы монодромии этой траектории. Допуская известную вольность, можно сказать, что квантовая стохастичность проявляет скрытые упорядоченные структуры классического движения. В классической механике эти структуры имеют нулевую меру и их можно наблюдать только при выборе начальных условий прямо на периодических траекториях (и их входящих сепаратрисах).

2. Пусть $G(q'', q', E)$ – функция Грина уравнения Шредингера в энергетическом представлении. Тогда

$$\langle |\psi(q)|^2 \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_{\{n\}} |\psi_n(q)|^2 = \frac{\langle \text{Im} G(q, q, E) \rangle}{\int \langle \text{Im} G(q, q, E) \rangle dq}, \quad (1)$$

где знаком $\langle \rangle$ обозначено усреднение по области $E_0 - \Delta E/2 < E < E_0 + \Delta E/2$, сумма берется по всем собственным функциям с энергией в указанном интервале, N – число таких функций.

При $\Delta E \rightarrow 0$ и $E_0 \rightarrow E_n$ это соотношение имеет разный смысл для интегрируемых и неинтегрируемых систем. Для многомерных интегрируемых задач вырожденность высоковозбужденных уровней неизбежна и в сумму (1) входит большое число вырожденных состояний. Для неинтегрируемых систем общего положения возможно только случайное вырождение и правая часть этой формулы переходит в квадрат модуля индивидуальной волновой функции.

3. В основе дальнейших вычислений лежит стандартное выражение для квазиклассического предела функции Грина в виде суммы по всем классическим траекториям, соединяющих две точки. (см. например,^{2, 3} и ссылки в них). В двумерном пространстве

$$\begin{aligned} G(q, q, E) &= \tilde{G}(q, E) + G^{osc}(q, E), \\ \tilde{G}(q, E) &= -\pi \int \delta(E - H(p, q)) \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2}, \\ G^{osc}(q, E) &= \frac{1}{i\hbar(2\pi i\hbar)^{1/2}} \sum |\Delta|^{1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(q, q, E) - i\nu \frac{\pi}{2}\right), \end{aligned} \quad (2)$$

где $\tilde{G}(q, E)$ – вклад траекторий нулевой длины, соответствующих приближению Томаса – Ферми, $G^{osc}(q, E)$ – вклад классических траекторий с конечным действием $S(q, q, E)$. Δ – некоторый детерминант из вторых производных от действия. ν – фаза, равная числу со-

ряженных точек на траектории. Для систем типа билиардов с условиями равенства нулю волновой функции на границе к ν надо прибавить удвоенное число отражений от границы. Считая $G^{osc} \ll \tilde{G}$ и $H(p, q) = \frac{1}{2}p^2 + U(q)$, находим

$$\langle |\psi(q)|^2 \rangle = \frac{1}{V} \left(1 - 2\hbar^2 \langle \text{Im } G^{osc} \rangle - \frac{1}{V} \int \langle \text{Im } G^{osc} \rangle dq \right), \quad (3)$$

где V — площадь доступной области в q пространстве (вне этой области первый член в (3) обращается в ноль).

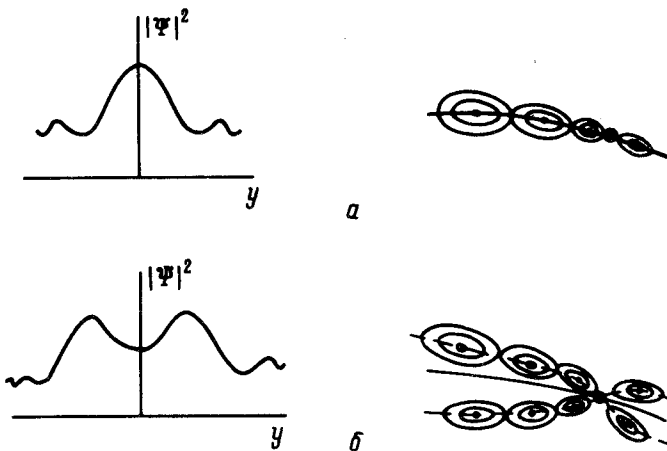


Рис. 1

Рис. 1. Примерное поведение усредненного квадрата волновой функции в окрестности неустойчивой периодической траектории. Слева — сечение поперек траектории. Справа — рельеф волновой функции вдоль траектории

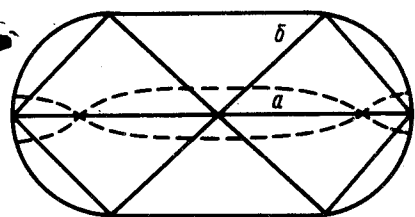


Рис. 2

Рис. 2. Некоторые периодические траектории для билиярда "стадион" — a — простейшая периодическая траектория. Пунктирной линией указано положение максимумов волновой функции вблизи этой траектории; b — особая периодическая траектория

4. Сумма в $G^{osc}(q, E)$ формально включает все классические траектории с фиксированной энергией, начинающиеся и кончающиеся в точке q , причем время движения по траектории может быть сколь угодно велико. Таких траекторий бесконечно много и для неинтегрируемых задач суммирование по ним практически невозможно (см., впрочем, ⁴), или, во всяком случае, не легче непосредственного решения уравнений Шредингера. Так как соседние уровни энергии и мелкомасштабные флуктуации волновых функций разумно описывать статистически ^{1, 5}, то точное вычисление функции Грина, по-видимому, лишено смысла. Сгладим волновые функции как по энергии, так и по координатам. После усреднения по интервалу ΔE главный вклад в (2) будут вносить классические траектории, время движения по которым $T = \partial S / \partial E$ будет ограничено: $T \lesssim 2\pi\hbar / \Delta E$. Аналогично, после усреднения по малому интервалу Δq заметный вклад в сумму будут вносить траектории, для которых изменение импульса $\Delta p = \partial S / \partial q'' + \partial S / \partial q'$ будет мало: $\Delta p \lesssim \hbar / \Delta q$. Если при $\Delta p \neq 0$ матрица вторых производных не вырождена, то вблизи данной траектории будет находиться периодическая траектория, для которой $\partial S / \partial q'' + \partial S / \partial q' = 0$ при $q'' = q'$. Это означает, что после указанных усреднений в квазиклассическую функцию Грина дают вклад только траектории, расположенные в малой окрестности короткопериодических траекторий. Здесь неявно предполагается, что рассматриваемые периодические траектории изолированы (и гиперболичны). Для эргодических систем другие варианты невозможны (за исключением семейств нейтральных траекторий).

5. Введем в окрестности периодической траектории систему координат, выбрав ось x вдоль траектории, а ось y перпендикулярно ей. После простых вычислений получаем:

$$\langle G^{osc}(q, E) \rangle = \frac{1}{i\hbar(2\pi i\hbar)^{1/2}} \sum_{\text{пер траек}} \frac{D(x)^{1/2}}{|\dot{q}(x)|} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(\bar{S} + \frac{w(x)}{2}y^2\right) - i\frac{\pi}{2}\right), \quad (4)$$

где $|\dot{q}(x)|$ – модуль скорости вдоль периодической траектории,

$$D(x) = 1/M_{12}(x), \quad w(x) = (M_{11}(x) + M_{22}(x) - 2)D(x).$$

$M_{ij}(x)$ – элементы матрицы монодромии по переменным y, \dot{y} в точке x за период:

$$\begin{pmatrix} y(T) \\ \dot{y}(T) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}(x) & M_{12}(x) \\ M_{21}(x) & M_{22}(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y(0) \\ \dot{y}(0) \end{pmatrix}. \quad (5)$$

В отличие от (2) суммирование в (4) проводится по конечному числу периодических траекторий с периодом $T \ll 2\pi\hbar/\Delta E$, где ΔE – интервал усреднения по энергии. (В сумму включаются и многократные прохождения одной траектории).

Формулы (3), (4) связывают усредненный квадрат волновой функции в окрестности периодической траектории с классическими величинами, характеризующими эту траекторию. Вклад каждой периодической траектории пропорционален $\sqrt{\hbar|D|/|\dot{q}|}$ и заметен в узкой полосе шириной $\sqrt{2\pi\hbar/|w|}$ вокруг нее. В зависимости от значений параметров максимум волновой функции может достигаться как на самой периодической траектории (см. рис. 1, а), так и на некотором расстоянии от нее пропорциональном $1/\sqrt{|w|}$ (см. рис. 1, б). Значительное усиление $\langle |\psi(q)|^2 \rangle$ будет наблюдаться вблизи точек, в которых $D \rightarrow \infty$. Эти точки (аналоги каустик) представляют собой самофокальные точки, в которых вышедшие лучи собираются обратно через период. В окрестности таких точек простое квазиклассическое приближение (2) не применимо. Соответствующие формулы см., например, в ⁶. Увеличение плотности будет иметь место и внутри резких изгибов траектории.

6. Рассмотрим модельную квантовую задачу об определении собственных функций оператора Лапласа с нулевыми граничными условиями в области типа "стадион", которая представляет собой квадрат со стороной $2R$ с приставленными к нему двумя полукругами радиуса R . В работе ⁷ указано, что значительная доля высоковозбужденных волновых функций в этой задаче имеет повышенную плотность вблизи периодических траекторий. При проведении вычислений по формуле (4) необходимые короткопериодические траектории и их матрицы монодромии не трудно найти численно. Для простых траекторий вычисления можно провести аналитически. Отметим некоторые результаты проведенных вычислений (см. рис. 2). Для гиперболических траекторий без отражений волновая функция имеет вид, показанный на рис. 1, б. Такая двугорбая структура хорошо заметна на рисунках работы ⁷. Интересной особенностью обладает периодическая траектория, указанная на рис. 2, б. Обычно квадрат модуля волновой функции симметричен относительно периодической траектории, но для этой траектории это не так из-за того, что она отражается от особых точек границы, в которых вторая производная разрывна. Вследствии этого для нее существует не одна матрица монодромии (5), а четыре, соответствующие разным знакам y и \dot{y} . Это приводит к тому, что волновая функция заметно больше с одной стороны периодической траектории. Именно такое поведение было обнаружено в работе ⁷. Количественное сравнение с результатами этой работы не представляется возможным, так как в ней не указаны значения энергии, соответствующие приведенным рисункам рельефа волновых функций.

Автор благодарен Д.Л.Шепелянскому за указание работы ⁷ и Л.Н.Щуру и Д.Е.Хмельницкому за многочисленные полезные обсуждения.

Литература

2. *Gutzwiller M.C.* J. Math. Phys. 1971, 12, 343.
3. *Berry M.V., Mount M.E.* Rep. Prog. Phys., 1972, 35, 315.
4. *Gutzwiller M.C.* Physica D., 1982, 5, 183.
5. *Shapiro M., Goelman G.* Phys. Rev. Lett., 1984, 53, 1714.
6. *Кравцов Ю.А., Орлов Ю.И.* УФН, 1983, 141, 591.
7. *Heller E.J.* Phys. Rev. Lett., 1984, 53, 1515.

Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
1 июля 1986 г.
16 сентября 1986 г.