

# Strahlenspaltung und Quantenchaos

R. Blümel und A. Kohler

Über die Bedeutung von Newtonschen periodischen Bahnen für das Spektrum von Quantensystemen ist in den Physikalischen Blättern schon mehrfach berichtet worden. Neben den Newtonschen Bahnen treten jedoch in Feynmans Formulierung der Quantenmechanik auch nicht-Newtonsche Bahnen auf, also Bahnen, die die Newtonschen Bewegungsgleichungen nicht erfüllen. Der Verdacht liegt daher nahe, daß in bestimmten Fällen auch nicht-Newtonsche periodische Bahnen wichtig sind. In der Tat treten bei scharfen Potentialstufen nicht-Newtonsche „Geisterbahnen“ auf, die sich z. B. im Quantenspektrum von Stufenbillards eindeutig identifizieren lassen.

Im Lehrbuch der Quantenmechanik von Landau und Lifschitz [1] findet sich folgende Übungsaufgabe (§ 25, Aufgabe 3): Man berechne die quantenmechanische Reflexionswahrscheinlichkeit für das eindimensionale Potential

$$U(x) = U_0 / [1 + \exp(-\alpha x)]. \quad (1)$$

Der Potentialverlauf ist in Abb. 1 skizziert. Aufgrund der speziellen Form des Potentials läßt sich die Reflexionswahrscheinlichkeit  $R$  eines von links einlaufenden Teilchens der Masse  $m$  und der Energie  $E > U_0$  analytisch berechnen. Für  $x \rightarrow -\infty$  ist das Teilchen praktisch frei, und der Impuls ist durch  $p = (2mE)^{1/2}$  gegeben. Die de-Broglie-Wellenlänge ist  $\lambda = 2\pi\hbar/p$ , die de-Broglie-Wellenzahl  $k = p/\hbar$ , wobei  $\hbar$  die Plancksche Konstante ist. Für  $x \rightarrow +\infty$  erhält man entsprechend die Wellenzahl  $\kappa = (2m(E - U_0))^{1/2}/\hbar$ . Definieren wir die effektive Breite  $d = 1/\alpha$  des Potentials (siehe Abb. 1), so finden wir mit Landau und Lifschitz [1]

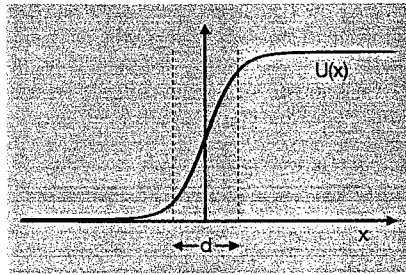


Abb. 1: Eindimensionales Modelpotential nach Landau und Lifschitz [1].

$$R = \frac{\sinh^2 [d\pi(k - \kappa)]}{\sinh^2 [d\pi(k + \kappa)]}. \quad (2)$$

Neben der Energie  $E$  und der Potentialstärke  $U_0$  enthält die Reflexionswahrscheinlichkeit  $R$  zwei essentielle Parameter  $d$  und  $\hbar$ . Wegen der einfachen analytischen Struktur von (2) lassen sich verschiedene  $(d, \hbar)$ -Regime sehr einfach studieren. Wir interessieren uns vor allem für das Regime  $d \rightarrow 0, \hbar \rightarrow 0$ : Im Grenzfall  $d \rightarrow 0$  wird nämlich aus  $U(x)$  ein Stufenpotential, und  $\hbar \rightarrow 0$  entspricht dem semiklassischen Regime, das schon seit längerer Zeit, vor allem im Zusammenhang mit klassisch chaotischen Systemen untersucht wird (siehe z. B. [2, 3]). Lassen wir gleichzeitig  $d \rightarrow 0$  und  $\hbar \rightarrow 0$  gehen, so ist das Ergebnis ohne weitere Angaben unbestimmt. Zur Verdeutlichung untersuchen wir zwei Spezialfälle dieses Doppellimes, die wir mit L1 und L2 bezeichnen. L1 soll bedeuten, daß zunächst der Grenzwert  $\hbar \rightarrow 0$  gebildet wird und dann erst  $d \rightarrow 0$ . Dieser Grenzfall führt uns auf die Newtonsche Mechanik, aufgrund derer wir  $R = 0$  für  $E > U_0$  erwarten. Dies läßt sich durch Grenzübergang in (2) direkt bestätigen. Mit L2 ist gemeint, daß wir zuerst  $d \rightarrow 0$  schicken und dann erst  $\hbar \rightarrow 0$ . Für festes  $\hbar$  und  $d \rightarrow 0$  erhalten wir mit (2)

$$\lim_{d \rightarrow 0} R = R_S = \left( \frac{k - \kappa}{k + \kappa} \right)^2. \quad (3)$$

Es ist jetzt interessant zu sehen, daß  $R_S$  völlig unabhängig von  $\hbar$  ist, da sich  $\hbar$  in (3) herauskürzt. Die Reflexionsformel (3) gilt also auch im rein klassischen Fall, d. h. für  $\hbar = 0$ .

Dies hat die absurd erscheinende Konsequenz, daß ein mit  $E > U_0$  auf die Potentialstufe einlaufendes klassisches Teilchen mit endlicher Wahrscheinlichkeit reflektiert wird. Dies ist jedoch kein Widerspruch zum Korrespondenzprinzip, da dieses nur für genügend glatte Potentiale gilt [1]. So seltsam der Limes L2 erscheinen mag, so ist er doch von großer theoretischer und praktischer Bedeutung. Für feste Energie  $E$  impliziert  $\hbar \rightarrow 0$  den Grenzfall  $\lambda \rightarrow 0$ . In der Optik entspricht dies dem Strahlenlimes, der auf die geometrische Optik bzw. die Strahlenoptik führt. Der Grenzfall L2 tritt hier immer dann auf, wenn sich die Materialeigenschaften eines optischen Mediums über eine optische Wellenlänge stark ändern. Ein Beispiel ist die Grenzfläche zwischen zwei transparenten Dielektrika mit unterschiedlichem Brechungsindex. Ein Lichtstrahl, der auf die Grenzfläche fällt, wird im allgemeinen in einen reflektierten Strahl und einen transmittierten Strahl aufgespalten. Wir nennen dieses Phänomen Strahlenspaltung. Klassisch gesprochen geht durch Strahlenspaltung der Determinismus verloren, da sich ein Lichtteilchen, das auf eine Grenzfläche trifft, „entscheiden“ muß, ob es dem reflektierten oder dem transmittierten Strahl folgen soll. Diese Entscheidung wird stochastisch aufgrund der Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeiten gefällt.

In der Quantenmechanik entspricht der Limes L2 genau diesem optischen Analogon. An der Potentialstufe wird das Teilchen mit der Wahrscheinlichkeit  $R$  nach links zurückgeworfen, mit der Wahrscheinlichkeit  $1 - R$  nach rechts transmittiert. Im Fall L1 ist der quantenmechanische Strahlenlimes die Newtonsche Mechanik, im Fall L2 eine neuartige nichtdeterministische, nicht-Newtonsche Mechanik, deren essentielles Element die Strahlenspaltung ist, d. h. die Aufspaltung der klassischen Trajektorie des Teilchens an der Potentialstufe. Akustische und quantenmechanische Systeme mit Strahlenspaltung sind von Couchman *et al.* 1992 im Zusammenhang mit Chaos untersucht worden [4].

Dr. Reinhold Blümel, Dipl.-Phys. Achim Kohler, Fakultät für Physik, Albert-Ludwigs-Universität, Hermann-Herder-Str. 3, D-79104 Freiburg

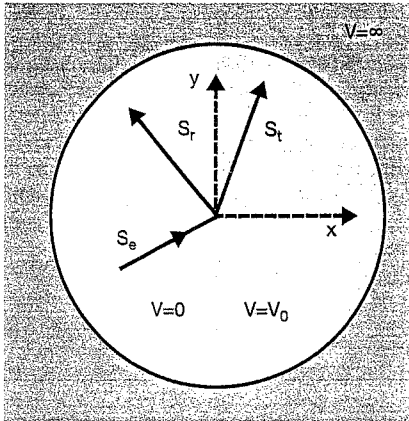


Abb. 2: Das kreisförmige Stufenbillard. An der Grenzlinie  $x=0$  wird ein einlaufender Strahl  $S_e$  aufgespalten in den reflektierten Strahl  $S_r$  und den transmittierten  $S_t$ .

Wir wollen nun zeigen, daß Strahlensplattung direkte Konsequenzen für die Spektren und Wellenfunktionen von Quantensystemen hat. Umgekehrt zeigen wir auch, daß die Quantenspektren von Systemen mit Strahlensplattung Information über nicht-Newton'sche Strahlen enthalten. Im folgenden nennen wir die nicht-Newton'schen Bahnen auch Geisterbahnen, da sie mit den von Kuš *et al.* eingeführten „ghost orbits“ verwandt sind [5]. In Systemen mit Strahlensplattung entscheidet sich die Quantenmechanik eindeutig für die nichtdeterministische, nicht-Newton'sche Mechanik als die relevante Mechanik im semiklassischen Limes. Um die Existenz von Geisterbahnen zu beweisen, untersuchen wir ein „Stufenbillard“, d. h. ein Teilchen, das sich in einem zweidimensionalen Potential der Form

$$V(x,y) = \begin{cases} \infty & \text{für } r > r_0 \\ V_0 \Theta(x) & \text{für } r < r_0 \end{cases} \quad (4)$$

bewegt. Hierbei ist  $\Theta(x)$  die Sprungfunktion, definiert durch  $\Theta(x)=0$  für  $x < 0$  und  $\Theta(x)=1$  für  $x > 0$ ,  $r=(x^2+y^2)^{1/2}$  ist die Radialkoordinate des Teilchens, und  $r_0$  ist der Radius des Bereichs, in dem  $V$  endlich ist. Das Potential  $V$  ist in Abb. 2 schematisch dargestellt. Es ähnelt einem unendlich hohen kreisförmigen Brunnen mit einer scharfen Potentialstufe entlang des Kreisdurchmessers bei  $x=0$ . Strahlensplattung ist in Abb. 2 ebenfalls skizziert. Ein Teilchen läuft auf dem Strahl  $S_e$  ein. Es trifft auf die Potentialstufe und wird nun entweder auf dem Strahl  $S_r$  weiterlaufen (es wird reflektiert), oder es wählt den Strahl  $S_t$  (es wird transmittiert). Es zeigt sich, daß die Newton'sche Dynamik eines Teilchens in  $V$  klassisch chaotisch ist [6]. Das durch  $V$  definierte Quantenproblem gehört also in die Klasse der quantenchaotischen Systeme. Wegen der Spiegelsymmetrie von  $V$  bezüglich der  $x$ -Achse lassen sich die Energien und Wellenfunktionen in zwei Klassen mit posi-

tiver und negativer Parität einteilen. Wir kennzeichnen dies mit einem hochgestellten Index „+“ bzw. „-“. Für den Fall eines Elektrons in einem kreisförmigen Stufenbillard (siehe Abb. 2) mit Durchmesser  $2r_0=0.1 \mu\text{m}$  und einer Potentialhöhe von  $V_0=1.52 \text{ meV}$  berechneten wir numerisch die ersten 50 Quantenenergien  $E_n^{(+)}$  und die zugehörigen Wellenfunktionen  $\psi_n^{(+)}$  positiver Parität. Eine Auswahl von zwölf Wellenfunktionen ist in Abb. 3 als Graustufenplot dargestellt. Je dunkler die Schattierung in Abb. 3, desto größer ist  $|\psi_n^{(+)}(x,y)|^2$ . Die Nummer  $n$  der Wellenfunktionen ist dabei rechts oben an die entsprechende Wellenfunktion angeschrieben. Der Grundzustand entspricht  $n=1$ . Die ersten sechs Wellenfunktionen  $n=1, \dots, 6$  gehören zu Quantenenergien  $E_n$  mit  $E_n < V_0$ . Sie sind daher bis auf einen deutlich sichtbaren Tunneleffekt links von der Potentialstufe lokalisiert. Für  $n=7$  und  $n=8$  ist  $E_n > V_0$ , und die Wellenfunktionen „schwappen“ nun auch nach rechts über. Die Wellenfunktion  $n=7$  hält sich hierbei noch etwas zurück, da ihre Energie nur knapp über  $V_0$  liegt. Die Wellenfunktion  $n=8$  aber hat ihren Schwerpunkt schon ganz auf der rechten Seite des Potentials. Die letzten vier Wellenfunktionen in Abb. 3 sind eine Auswahl von vier markanten Typen von Wellenfunktionen, die man für  $E_n > V_0$  findet. Die Wellenfunktion  $n=26$  ist ein Vertreter des „chaotischen Typs“. Solche Wellenfunktionen („ergodische“ Wellenfunktionen) werden aufgrund der klassischen Chaotizität des Stufenbillards erwartet [2, 3]. Die Wellenfunktion  $n=38$  illustriert das Auftreten von Strahlensplattung im Stufenbillard. Eine einfallende, fast ebene

Welle wird an der Potentialstufe teilweise reflektiert und teilweise transmittiert. Wie in der geometrischen Optik folgen die Wellenvektoren dem Verlauf von spekulär reflektierten und nach dem Snellschen Gesetz transmittierten Strahlen (siehe Pfeile). Die Wellenfunktion  $n=43$  ist ein Vertreter vom Typ der „Flüster-Galerie-Wellenfunktionen“, die zuerst von Lord Rayleigh im Zusammenhang mit akustischen Wellen richtig interpretiert und beschrieben wurden [7]. Die Wellenfunktion  $n=50$  ist ein typischer Vertreter einer Serie von Wellenfunktionen, die Ausdruck des aus der Optik bekannten Phänomens der totalen internen Reflexion sind. Diese Wellenfunktionen sind ganz innerhalb eines Sektors lokalisiert, der von der Potentialstufe und einem Radius mit dem kritischen Winkel für Totalreflexion aufgespannt wird.

Wir demonstrieren nun, daß im Quantenspektrum des Stufenpotentials Information über Geisterbahnen enthalten ist. Hierzu verwenden wir ein Verfahren, das von Wintgen stammt [8] und bereits in den Physikalischen Blättern beschrieben wurde [3]. Wintgen stellte nämlich fest, daß eine geeignete Fourier-Transformierte des Quantenspektrums scharfe Peaks aufweist, die sich klassischen periodischen Bahnen zuordnen lassen. Ein eindeutiger Hinweis auf die Existenz und Wichtigkeit von Geisterbahnen wären also Peaks in der Fourier-Transformierten des Spektrums, die sich keiner Newton'schen Bahn, wohl aber bestimmten Geisterbahnen zuordnen ließen. Das Verfahren von Wintgen verlangt die Berechnung von Energie-Eigenwerten  $E_n^{(\pm)}(\eta)$ , die so definiert sind, daß nicht  $V_0$  konstant ist, sondern das Ver-

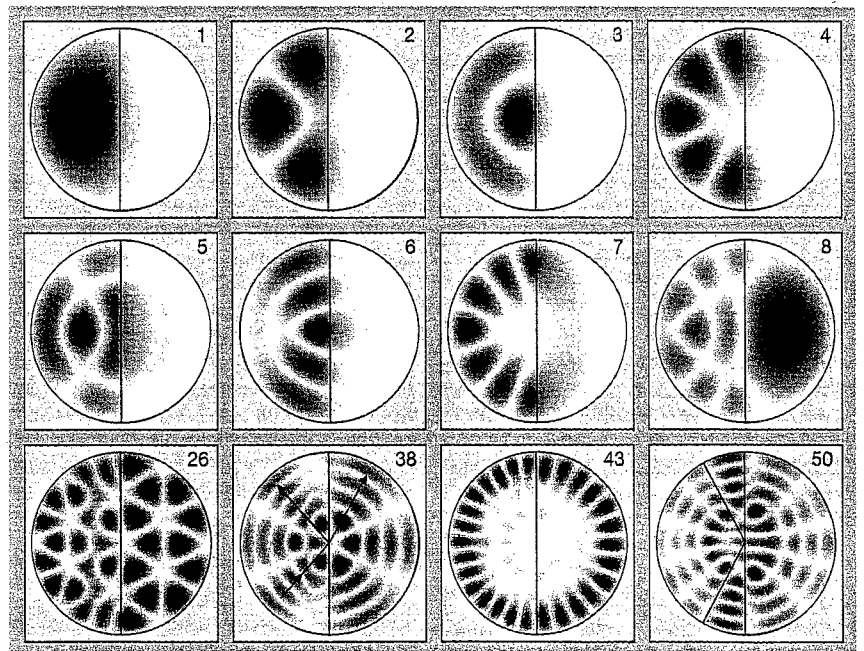


Abb. 3: Graustufenplots von ausgewählten Wellenfunktionen  $\psi_n^{(+)}$  des kreisförmigen Stufenbillards. Die Quantenzahl  $n$  der Wellenfunktionen ist jeweils rechts oben angegeben (siehe Text).

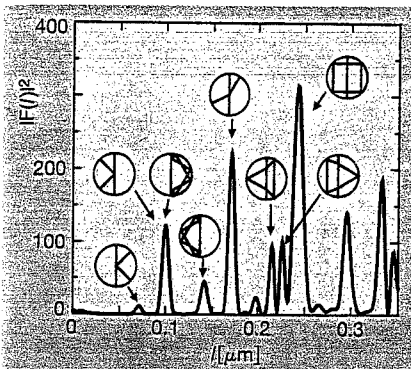


Abb. 4: Fourier-Transformierte der verallgemeinerten Niveaudichte des Stufenbillards mit der Zuordnung zu klassischen Bahnen. Die 1. und die 3. Bahn (von links) sind eindeutig nicht-Newtonsche Geisterbahnen, die rechten vier Bahnen sind Newtonsche Bahnen, und die 2. und 4. Bahn lassen sich wegen der Möglichkeit der totalen internen Reflexion (siehe Text) nicht eindeutig klassifizieren.

hältnis  $\eta = V_0/E_n$ . Dies führt auf ein verallgemeinertes quantenmechanisches Eigenwertproblem, das man numerisch lösen kann [6]. Mit Hilfe der verallgemeinerten Energieniveaus definieren wir die verallgemeinerte Niveaudichte

$$\rho^{(\pm)}(E, \eta) = \sum_n \delta(E - E_n^{(\pm)}(\eta)). \quad (5)$$

Glättet man (5), so erhält man die mittlere verallgemeinerte Niveaudichte  $\bar{\rho}^{(\pm)}(E, \eta)$ , mit deren Hilfe man den oszillierenden Teil  $\tilde{\rho}^{(\pm)} = \rho^{(\pm)} - \bar{\rho}^{(\pm)}$  berechnen kann. Auf der Basis von 200 Energieniveaus  $E_n^{(\pm)}(\eta = 1/2)$  berechneten wir

$$F(l) = \int \tilde{\rho}^{(+)}(E, \eta = 1/2) \times \exp(-il(2mE)^{1/2}/\hbar) dE, \quad (6)$$

wobei wir  $l$  in Analogie zur Strahlenoptik als die optische Weglänge des Quantenteilchens interpretieren. Das Resultat ist in Abb. 4 dargestellt. In der Tat zeigt  $F(l)$  scharfe Peaks bei bestimmten Werten der optischen Weglänge, die wir klassischen periodischen Bahnen zuordnen können. Tatsächlich kommen unter diesen klassischen Bahnen auch Geisterbahnen vor. So läßt sich der erste Peak in  $F$  bei  $l \approx 0.07 \mu\text{m}$  keiner Newtonschen Bahn zuordnen. Man kann ihn jedoch einer Familie von Geisterbahnen auf der Seite, auf der das Potential auf  $V_0$  liegt, zuordnen. Diese Geisterbahnen werden – überzeugend nicht-Newtonsch – auf der hohen Seite der Potentialstufe reflektiert. Wir beachten, daß wegen  $\eta = 1/2$  die Energie  $E$  des Teilchens überhalb der Potentialschwelle  $V_0$  liegt und eine Newtonsche Bahn also niemals nach rechts zurückgeworfen würde. Ganz analog lassen sich auch die restlichen Peaks in  $F(l)$  interpretieren und jeweils Newtonschen oder Geisterbahnen zuordnen. Die genaue Entsprechung ist in Abb. 4 graphisch angedeutet.

Wir haben damit gezeigt, daß nicht-Newtonsche Geisterbahnen für deutlich erkennbare Strukturen in der Niveaudichte von Quantensystemen mit Strahlenspaltung verantwortlich sind. Geisterbahnen haben daher in der Quantenmechanik einen mit den Newtonschen Bahnen vergleichbaren Stellenwert. Es stellt sich die Frage, ob sich Geisterbahnen denn auch experimentell nachweisen lassen. Dies ist in der Tat möglich. So wurden die Dimensionen unseres Modell-Stufenpotentials bereits mit Blick auf eine mögliche Realisierung als mesoskopisches System gewählt. Eine weitere Realisierungsmöglichkeit, die auch die Universalität von Strahlenspaltungsphänomenen demonstriert, ergibt sich im Zusammenhang mit Mikrowellen. In Analogie zu den erstmals von Stöckmann und Stein durchgeführten Mikrowellenexperimenten mit billardförmigen Resonatoren [9] schlugen Prange *et al.* vor, das Spektrum von flachen Mikrowellenresonatoren zu untersuchen, die teilweise mit praktisch verlustfreien Dielektrika gefüllt sind [10]. Es läßt sich zeigen, daß die Maxwell-Gleichungen für solche Resonatoren dieselbe Struktur haben wie die Schrödinger-Gleichung eines Stufenbillards. Man sollte also auch Geisterbahnen in den Spektren dieser Mikrowellenresonatoren identifizieren können. Wir sehen der Veröffentlichung diesbezüglicher Resultate mit Spannung entgegen.

\*

Unsere Forschungsarbeiten zum Thema Strahlenspaltung und Quantenchaos werden zur Zeit von der Deutschen Forschungsgemeinschaft im Rahmen des SFB 276 finanziell gefördert. Dafür wollen wir uns an dieser Stelle recht herzlich bedanken.

#### Literatur

- [1] L. D. Landau und E. M. Lifschitz, Quantenmechanik, Akademie-Verlag, Berlin, 1971.
- [2] G. Wunner, Phys. Bl. **45**, 139 (1989).
- [3] D. Wintgen, Phys. Bl. **49**, 641 (1993).
- [4] L. Couchman, E. Ott und T. M. Antonsen, Jr., Phys. Rev. A **46**, 6193 (1992).
- [5] M. Kuš, F. Haake und D. Delande, Phys. Rev. Lett. **71**, 2167 (1993).
- [6] R. Blümel, T. M. Antonsen, B. Georgeot, E. Ott und R. E. Prange, Phys. Rev. Lett. **76**, 2476 (1996); Phys. Rev. E **53**, 3284 (1996).
- [7] J. W. S. Rayleigh, The Theory of Sound, Dover, New York, 1945, Band II, S. 126.
- [8] D. Wintgen, Phys. Rev. Lett. **58**, 1589 (1987).
- [9] H.-J. Stöckmann und J. Stein, Phys. Rev. Lett. **64**, 2215 (1990).
- [10] R. E. Prange, E. Ott, T. M. Antonsen, Jr., B. Georgeot und R. Blümel, Phys. Rev. E **53**, 207 (1996).

## Reinmetalle, Legierungen, Verbindungen, Keramiken, Polymere und Verbundwerkstoffe ...



Was immer Sie in Forschung, Entwicklung oder Konstruktion an hochwertigen Materialien, speziell in kleinen oder kleinsten Mengen, brauchen: Goodfellow liefert es Ihnen! Schnell, zuverlässig und preisgünstig. In den unterschiedlichsten Ausführungen und Abmessungen. Allein über 52 000 Artikel standardmäßig. Keiner bietet Ihnen mehr. Überzeugen Sie sich davon im 560 Seiten starken Goodfellow-Katalog. Sie erhalten ihn kostenlos von:

### Goodfellow

Goodfellow GmbH  
Postfach 13 43  
D-61213 Bad Nauheim  
Telefon (0 60 32) 40 34  
Telefax (0 60 32) 47 65