陆 军 著

量子小体系的相空间束缚态与输运过程

清华大学出版社

陆军 著

量子小体系的相空间束缚态与输运过程

清华大学出版社
北京

图书在版编目（CIP）数据

量子小体系的相空间束缚态与输运过程 / 陆军著. --北京 ：清华大学出版社，2012.7
ISBN 978-7-302-29234-0

Ⅰ. ①量…　Ⅱ. ①陆…　Ⅲ. ①量子力学－相空间－束缚态－输运理论　Ⅳ. ①O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 143496 号

责任编辑：朱红莲　赵从棉
封面设计：常雪影
责任校对：刘玉霞
责任印制：李红英

出版发行：清华大学出版社
网　　址：http://www.tup.com.cn，http://www.wqbook.com
地　　址：北京清华大学学研大厦 A 座　　邮　　编：100084
社 总 机：010-62770175　　邮　　购：010-62786544
投稿与读者服务：010-62776969，c-service@tup.tsinghua.edu.cn
质 量 反 馈：010-62772015，zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn
印 装 者：三河市金元印装有限公司
经　　销：全国新华书店
开　　本：170mm×230mm　　印　　张：6.75　　字　　数：117 千字
版　　次：2012 年 7 月第 1 版　　印　　次：2012 年 7 月第 1 次印刷
印　　数：1～2000
定　　价：26.00 元

产品编号：045872-01

前言

有关物质本性的量子概念与已有的经典理论所联系的那些概念根本不同。经典理论总是使用一些直观的、容易想象的概念，而量子理论最初发展起来的是一种十分抽象的数学形式，它不仅使得科学知识的内容有了本质的变化，而且也使得用来表示这些知识的基本概念有了本质的变化。然而，虽然有这种极大的差异，我们还是有可能借助于 Bohr 的对应原理来建立量子理论，使其在经典极限下过渡到经典理论。尽管如此，我们仍然不能得出这样的结论：经典理论只是量子理论的一种极限形式，或者说，经典理论在逻辑上是量子理论的一种特殊情形。关于经典概念与量子概念之间关系的研究表明，目前形式下的量子理论实际上预先假定了经典概念的正确性，因此，不能将经典概念看成是量子概念的极限形式，而必须将其与量子理论结合起来，使得这两种概念在一套完备的描述中彼此相互补充。

物质的宏观性质和微观性质不是彼此毫不相干的，而是有着极密切的内在联系，因为量子力学的潜在可能性只有借助精确确定的经典事件才能实现。而且，这种内在的依赖关系是相互的，只有通过构成系统的分子的量子理论，我们才能充分理解这个系统的宏观行为。因此，为了描述整个系统的彼此互补的各个方面，宏观性质和微观性质二者都是必要的。实际上，经典的确定性和量子的潜在可能性，在提供关于整个系统的完备描述中是相互补充的。

相空间是一个纯粹的经典力学概念，它来源于经典力学的 Hamilton 表述。在经典的相空间理论中，位移和动量可以同时用来精确地描述体系的状态和计算力学量；而在量子力学中，由于受到 Heisenberg 测不准原理的制约，微观粒子不可能同时有确定的位置和动量。经典系统混沌运动的主要特征是轨道对初值的敏感性，更确切地说，是相空间中相邻轨道间指数型分离的特性。因此，当我们试图通过量子与经典之间的比较来研究量子动力学中的混沌现象时，最合适的描述方式是量子相空间分布表示。分布函数的概念在量子相空间理论的发展中一直占据着主导地位，借助于量子相空间理论，我们可

以在量子体系中恢复使用直观的经典力学图像，这正是量子相空间理论主要的意义和突出的优点。迄今为止，量子相空间理论仍在不断地发展和完善，应用范围也不断地扩大，例如，该理论在统计物理学、量子光学、碰撞理论，以及非线性物理等领域中都有广泛的应用，并获得了一些用通常的量子力学方法难以得到的结果。

Torres-Vega 和 Frederick 于 20 世纪 90 年代提出了一套新的量子力学相空间表述形式，这种量子相空间理论直接在相空间中定义力学量算符和 Schrödinger 方程或量子 Liouville 方程，通过在相空间中求解这两个方程来确定相空间中的波函数或概率密度函数。尽管从本质上说，Torres-Vega 和 Frederick 量子相空间表象是一种相干态表象，但是该理论的优点在于，对于量子力学中的态函数而言，几乎全部的数学性质都在相空间中得到了保留，因此，很多在通常的位移空间和动量空间中有用的方法和结果可以移植到相空间表示中来；量子相空间中的分布函数就是严格的量子相空间概率密度函数，因此处处为正；通过相空间中的量子 Liouville 方程可以直接将量子力学与经典力学对应起来；另外，这种量子相空间理论还特别适合于做半经典，尤其是多维半经典近似计算。

半经典理论是指在求解给定的量子力学问题时，寻找一类可使用经典量表达的近似解，而这个近似解在 Planck 常数很小时应给出正确的结果。我们知道，在处理量子力学中的具体问题时，除少数几个例子以外，往往是不能严格求解的，需要采用适当的近似方法。量子力学中最常用的近似方法有两种：微扰法和变分法。这两种方法虽然具有极广泛的应用，但都不适宜用来处理处于高激发态并显示出强动力学关联的量子系统。而量子力学中的半经典方法适用于几乎所有的量子系统，并且常常能给出十分精确的结果，特别是许多能用半经典方法得到良好结果的问题，恰恰是用传统量子力学计算方法求解时由于收敛太慢而无法得到正确答案的问题。另外，从量子系统的半经典描述中，我们往往能直接看到系统经典轨道行为的影响，这一特点使得它特别适合于用来描述各种经典现象的量子表现。

Wentzel, Kramers 和 Brillouin 提出的求解 Schrödinger 方程的一种半经典近似方法，成功地处理了势垒穿透这一重要的实际问题，并为早期量子论中的角动量量子化条件提供了量子力学的根据。然而，这种方法主要用来求解一维问题，虽然也能推广应用到可分离的多自由度系统上去，但不适用于不可积系统，因而不能用来讨论与经典混沌有关的量子现象。一种既适用于可积

系统，也适用于不可积系统的半经典近似方法，是对量子力学中传播子的路径积分表达式做半经典近似估算，这种半经典方法的一个重要发展是Gutzwiller等人提出的态密度的周期轨道理论。该理论将量子Green函数用经典表达式代替，并采用数学中的稳相近似，得到了态密度的半经典表达式。由于Gutzwiller的半经典周期轨道理论对于不可积系统同样成立，因此，该理论已成为人们探索所谓的“量子混沌运动”的有力工具。

Du和Delos在考虑磁场中的激发态原子时发展了一套与半经典的周期轨道理论相类似的闭合轨道理论，该理论成功地解释了困扰原子物理学近20年的准Landau振荡现象。不严格地说，量子力学中体系从一个态跃迁到另一个态，对应于经典力学中粒子从一个点跑到另一个点。按照Feynman路径积分理论，两个点之间的各轨道均应一视同仁地考虑，但是，沿不同轨道所贡献的几率波的相位不同，因而会导致干涉现象。这种干涉现象使一些轨道彼此相消，而另一些轨道则大大加强了。每一个这种加强了的轨道，均可以用一个正弦振荡项来表示，并对应着一个量子跃迁过程。而体系的量子谱函数作为能量的函数，可以表示成背景项加上很多正弦振荡项。这种半经典的近似方法不仅可以用来描述量子跃迁的经典本质，而且还可以在量子力学和经典力学之间架起一座桥梁，使量子力学中某些复杂的计算问题通过这种半经典近似得以大大地简化。

本书首先在Torres-Vega和Frederick量子相空间表象框架下，采用量子力学中的波动力学方法，对量子力学和量子化学中的一些典型的量子小体系问题进行了系统的研究，获得了δ势场、氢原子、谐振子和具有经验势能函数的双原子分子振子等体系的定态Schrödinger方程的严格解，并将这种方法推广到处理用于模拟Bose-Einstein凝聚态的非线性Schrödinger方程。这些研究显示了相空间中定态Schrödinger方程解的不唯一性。我们发现，通过解定态Schrödinger方程得到的相空间本征函数可以利用“类Fourier”投影变换分别投影到位移空间和动量空间中去，从而得到相应空间中的本征函数。我们还利用相空间中的量子概率密度函数诠释了相空间中的Heisenberg测不准原理。

然后，我们在闭合轨道理论思想的基础上，用系统的本征值和本征波函数定义了一种新的量子谱函数作为能量的函数，这种量子谱函数的Fourier变换包含了该系统从一个给定点到另一个给定点的经典轨道的信息，从而提出一种新的经典-量子对应，发展了周期轨道理论和闭合轨道理论的思想。

我们再以一类量子小体系——二维矩形腔中的弹子球运动为例，定量地计算了所定义的量子谱函数，揭示了这种量子谱函数与经典轨道之间的对应关系，描述了这种量子小体系中的量子输运过程。另外，我们还针对另一个有趣的量子小体系做了类似的研究，这个系统的二维矩形腔的长度和宽度是按比例连续变化的。由于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，对这类量子小体系输运过程的研究具有较高的应用价值。

限于作者的学识水平，加之成书时间仓促，本书定有疏漏、不当甚至错误之处，我们诚挚地恳请读者不吝给予指正。我们正对此翘首以待，不胜感激。

作者谨识

2012年5月

于北京联合大学

目录

第1章

绪　　论

量子力学是描述原子现象的基本理论，其所依据的实验资料几乎全是从超出人的直接感觉范围的物理事件中推引出来的，因此，这个理论必然含有一些不同于日常经验的物理概念。而相空间则是一个纯粹的经典力学概念，它来源于经典力学的 Hamilton 表述[1]。在经典的相空间理论中，位移和动量可以同时用来精确地描述体系的状态和计算力学量；而在量子力学中，由于受到 Heisenberg 测不准原理的制约，微观粒子不可能同时有确定的位置和动量。描述微观体系运动状态的基本方程——Schrödinger 方程，以及相应的波函数只能有位移变量，或只能有动量变量，这就形成了量子力学中的两种主要数学表象——位移表象和动量表象。

经典系统混沌运动的主要特征是轨道对初值的敏感性，更确切地说，是相空间中相邻轨道间指数型分离的特性。因此，当我们试图通过量子与经典之间的比较来研究量子动力学中的混沌现象时，最合适的描述方式是量子相空间分布表示。自从 1932 年 Wigner[2] 提出了量子力学的相空间分布函数以后，分布函数的概念在量子相空间理论的发展中一直占据着主导地位。借助于量子相空间理论，我们可以在量子体系中使用直观的经典力学图像，比如，量子力学中的力学量平均值可以像经典统计物理那样进行计算；量子力学中的运动现象也可以像经典力学那样用“轨迹”的概念来描述。当然，这里的“轨迹”与经典理论中的轨迹有着不同的定义，这些正是量子相空间理论主要的意义和突出的优点。迄今为止，量子相空间理论仍在不断地发展和完善[3]，应用范围也不断地扩大[3~7]，例如，该理论在统计物理学、量子光学、碰撞理论，以及非线性物理等领域中都有广泛的应用[8~12]，并获得了一些用通常的量子力学方法难以得到的结果。然而，由于受到 Heisenberg 测不准原理的制约，现有的各种量子相空间分布函数，包括 Wigner 分布函

数、标准序和反标准序分布函数[13]、Husimi 分布函数[14]、P 函数[8~10,15]和 Q 函数[10,16~18]等都存在着一定的缺陷。

到目前为止，Wigner 分布函数仍然是物理学和化学中应用最广泛的量子相空间分布函数，这是一种准概率分布函数，因为它在相空间中并不处处为正，这是 Wigner 分布函数的一大缺陷。1933 年，Kirkwood [13]提出了标准序和反标准序分布函数，这是继 Wigner 分布函数之后的第二类量子相空间分布函数，这类分布函数也和 Wigner 分布函数一样，在相空间中并非处处为正。1940 年，Husimi[14]提出了在相空间中处处为正的量子相空间分布函数，这是一种用含任意参数的 Gauss 函数进行平滑处理的相干态表示。Husimi 分布函数的缺陷是，它不能像 Wigner 分布函数那样满足边缘条件，而且该表示还引入了任意参数[19~28]。Glauber 等[8~10,15~18]于 20 世纪 60 年代又提出了 P 表示相空间分布函数(即正则序分布函数)和 Q 表示相空间分布函数(即反正则序分布函数)。后来在量子光学中被广泛使用的一种表示理论是 Drummond 等[29,30]改进的广义 P 表示理论。由于它存在着固有的缺陷，这些表示在量子光学之外尚未发现有效的应用。

1978 年，Prugovecki 等[31]建立了模糊量子相空间理论(或称为随机量子相空间理论)。该理论从 Husimi 的相干态表示出发，认为相空间中的点是模糊的或随机的，模糊程度由测不准原理确定，这样就对相空间中的点给予了新的解释，从而得到了半正定的量子相空间分布函数，并且该函数加权后可以满足边缘条件。必须指出的是，Prugovecki 理论只是在形式上精致而已，实际上并没有给出比 Husimi 分布函数更多的信息和结果，Husimi 分布函数的固有缺陷仍隐含其中，而且该理论几乎无法进行实际的计算和应用。

量子相空间理论的另一种重要表述形式是几何量子化方法[32~34]，该方法是以微分几何理论为基础建立的，与群表示理论和 Lie 代数有着密切的关系，这种方法主要应用于广义相对论和基本粒子理论中。另外，Schroeck[3]则在其著作中应用量子相空间理论对量子逻辑和量子测量理论做了成功的解释。

量子相空间理论应用最成功的领域之一是用相空间分布函数研究散射问题。20 世纪 50 年代，用 Wigner 分布函数表达势散射截面的可能性引起了很多人的关注[35,36]，Mori 等[37,38]完善了这种方法，那时的兴趣主要在于建立均匀或准均匀体系的量子动力学方程(即 Boltzmann 方程)[39,40]。例如，Remler 等用 Wigner 量子分布函数表述了核反应理论，并编制了计算程序；Carruthers 等将 Wigner 分布函数二次量子化，解决了量子场论中包容产生过程的部分问题[12,41~43]。同时，用 Wigner 分布函数表述非弹性散射和反应散

射的问题也引起了广泛的兴趣，并初步确立了计算跃迁概率的理论框架[44~56]。近年来，人们往往通过改进 Wigner 分布函数或构造其他等价的相空间分布函数来研究相空间中的量子动力学（包括化学反应），这些研究工作使量子相空间理论在处理复杂体系时的优越性充分地展示出来[57~72]。

量子相空间理论研究的主要内容之一是建立量子力学与经典力学之间的对应关系，这也是建立量子相空间理论的基本出发点。量子力学诞生以后，对量子力学与经典力学之间关系的理解一直引起人们特别的关注，这项研究的发展经历了从半经典理论到量子相空间理论的飞跃过程[2~7,16~18,73~100]。把特殊的经典轨迹或不变流形与典型的量子态对应起来的是半经典理论的方法，这种方法为我们提供了认识框架；而在经典力学范畴内直接表达量子态则是量子相空间理论的方法。用半经典量子化规则以及 WKB 近似对经典可积系统的研究已经获得了巨大的成功，然而，近年来对经典不可积系统的研究发现，半经典理论不能用来对从经典混沌过渡到量子混沌的过程进行半经典量子化。很多人对此进行了深入的探讨并尝试给出类似的量子化规则[101~108]，但目前尚未获得满意的结果。而量子力学的相空间理论是在同一个空间——即相空间中讨论量子力学和经典力学，所以讨论二者在一些性质上的对应关系，进而研究复杂的量子力学问题相对比较容易，这恰好弥补了半经典理论的不足。遗憾的是，由于受 Heisenberg 测不准原理的限制，量子力学的相空间理论不是唯一的，这是该理论的一大缺陷。这种不唯一性主要表现在所使用的数学函数或算符具有一定的任意性。各种量子相空间理论均有其优点和缺点，因此，长期以来，人们一直在不断地探索新的更有实用价值的量子相空间表述形式。

20 世纪 90 年代，Torres-Vega 和 Frederick（简称 T-F）[109,110]提出了一套新的量子力学相空间表述形式，这种量子相空间理论的主要特征是：①直接在相空间中定义力学量算符和 Schrödinger 方程或量子 Liouville 方程；②像在位移空间和动量空间中那样，在相空间中通过求解这两个方程来确定相空间中的波函数或概率密度函数。

T-F 量子相空间理论假设在相空间中存在着一套完全的基函数 $\Gamma(q,p)$，任何一个量子态 $|\Psi\rangle$ 可以在这套完全的基函数下表示为

$$\langle \Gamma(q,p) \mid \Psi\rangle = \Psi(q,p) \tag{1.1}$$

从而可以直接将量子相空间中的算符 $\hat{Q}$ 和 $\hat{P}$ 表示成

$$\hat{Q} = \frac{q}{2} + \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p} \tag{1.2}$$

$$\hat{P} = \frac{p}{2} - \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial q} \tag{1.3}$$

尽管从本质上说，T-F 量子相空间表象是一种相干态表象[111]，但是该理论的优点在于，形式上它存在着与通常量子力学的位移表象或动量表象中相似的公式，特别是其相空间波函数 $\Psi(q,p)$ 的时间演化方程是 Schrödinger 型的，即

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(t,\Gamma) = \left[\frac{1}{2\mu}\left(\frac{p}{2} - \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial q}\right)^2 + \hat{V}\left(\frac{q}{2} + \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\Psi(t,\Gamma) \tag{1.4}$$

同时，可以直接在相空间中求解本征函数和本征值，也可以像在位移空间或动量空间中那样计算力学量算符的平均值[112~115]。用这种方法建立的量子相空间理论的主要优点是：对于量子力学中的态函数而言，几乎全部的数学性质都在相空间中得到了保留，因此，很多在通常的位移空间和动量空间中有用的方法和结果可以移植到相空间表示中来；量子相空间中的分布函数就是严格的量子相空间概率密度函数，因此处处为正；通过相空间中的量子 Liouville 方程可以直接将量子力学与经典力学对应起来；另外，这种量子相空间理论还特别适合于做半经典，尤其是多维半经典近似计算。

在 T-F 量子相空间理论中，相空间中的波函数与位移空间或动量空间中的波函数之间的变换是采用“类 Fourier”投影变换，而 Prugovecki 的随机量子力学理论则是采用相干态变换，这是二者之间的不同之处。

众所周知，量子力学的位移表象和动量表象都是唯一的。在位移表象或动量表象中波函数可以确定到彼此只相差一个相因子。但在量子力学的相空间表象中，波函数却不是唯一的，这恰与存在着不同的量子相空间分布函数相类似。除 Torres-Vega 和 Frederick 于 1990 年建立的量子相空间表象以外，Ban[116,117] 于 1991 年建立了量子相空间的相对态表象，Harriman[118] 于 1994 年建立了量子相空间的线性变换表象，Møller[119] 于 1999 年建立了量子相空间的移位算符表象。Ban 还进一步证明了这些量子相空间表象之间的等价性[120,121]。

Torres-Vega 和 Frederick 在其量子力学相空间表示理论中得到的自由粒子的位移和动量本征函数不满足 Heisenberg 测不准关系，胡旭光等为了解决这一困难而引入了一个含有任意参数的 Gauss 型修正函数，其中的任意参数与测不准关系密切相关，它决定了测不准的范围，从而建立了描述自由粒子在相空间中运动的位移和动量本征函数[122]。

在建立相空间中的 Schrödinger 方程和量子 Liouville 方程以及讨论相空

间波函数与位移或动量空间中的波函数之间的数学变换时，Torres-Vega 和 Frederick 假定体系的相互作用势仅能展开成位移的正项级数。然而，实际体系的相互作用势往往含有位移的负幂项，例如原子体系和分子体系的库仑势。胡旭光等通过严格的数学推导，证明了 T-F 量子相空间理论完全可以被推广到包含位移负幂项的相互作用势体系，还得到了量子相空间中计算力学量平均值的一般公式，并且证明了相空间中的维里定理[112]。

非相对论量子力学所涉及的体系基本上可分为两大类，一类是非束缚态体系，另一类是束缚态体系。胡旭光等在 T-F 量子相空间理论框架内，对非束缚态问题建立了相空间表述，他们利用相空间的波函数和密度算符的观点分别严格表述了势散射理论，非弹性(态-态反应)散射理论和化学反应散射理论[69~72]。

Torres-Vega 和 Frederick 在建立他们的量子力学相空间表示理论中，已经对束缚态问题进行了一些讨论[109,110]。但是，对于量子力学中的一些典型的可解体系，Torres-Vega 和 Frederick 并未给出在相空间中切实可行的处理方法。本书试图在 Torres-Vega 和 Frederick 建立的量子相空间理论框架内，采用量子力学中的波动力学方法，对量子力学和量子化学中的一些典型的量子小体系问题进行严格求解，以期使 T-F 量子相空间理论中的一般 Schrödinger 方程的求解成为可能，并为该理论应用到处理半经典近似计算、量子混沌运动等多个领域打下基础。

量子理论实际发展的道路提示我们，有必要引入新的概念，即在给定系统的宏观性质和微观性质之间引入新的关系，而量子力学中的半经典理论恰好体现了这一思想。半经典理论是指在求解给定的量子力学问题时，寻找一类可使用经典量表达的近似解，而这个近似解在 Planck 常数 $\hbar$ 很小时应给出正确的结果。我们知道，在处理量子力学中的具体问题时，除少数几个例子以外，往往是不能严格求解的，需要采用适当的近似方法。量子力学中最常用的近似方法有两种：微扰法和变分法。这两种方法虽然具有极广泛的应用，但都不适宜用来处理处于高激发态并显示出强动力学关联的量子系统[5]。而量子力学中的半经典方法适用于几乎所有的量子系统，并且常常能给出十分精确的结果，特别是许多能用半经典方法得到良好结果的问题，恰恰是用传统量子力学计算方法求解时由于收敛太慢而无法得到正确答案的问题。另外，从量子系统的半经典描述中，我们往往能直接看到系统经典轨道行为的影响，这一特点使得它特别适合于用来描述各种经典现象的量子表现。

1926 年，Wentzel, Kramers 和 Brillouin 相继提出了当波函数的位相变

化率远大于势函数变化率时求解 Schrödinger 方程的一种半经典近似方法，该方法后来被称为 WKB 方法。它成功地处理了势垒穿透这一重要的实际问题，并为早期量子论中的角动量量子化条件提供了量子力学的根据。然而，WKB 方法主要用来求解一维问题，虽然也能推广应用到可分离的多自由度系统上去，但不适用于不可积系统，因此不能用来讨论与经典混沌有关的量子现象。

一种既适用于可积系统，也适用于不可积系统的半经典近似方法，是对量子力学中传播子的路径积分表达式做半经典近似估算。这种半经典方法的一个重要发展是 Gutzwiller 等人于 20 世纪 60～70 年代提出的态密度的周期轨道理论[101～104]。Gutzwiller 将量子 Green 函数用经典表达式代替，并采用数学中的稳相近似（stationary phase approximation）就得到了态密度的半经典表达式。该表达式包括两个部分，第一部分是光滑的背景项，第二部分则是所研究系统在经典动力学中的周期轨道贡献的振荡项之和。由于 Gutzwiller 的半经典周期轨道理论对于不可积系统同样成立，因此，该理论已成为人们探索所谓的“量子混沌运动”的有力工具[105,123]。

半经典的周期轨道理论使我们有可能完全依靠经典力学方法来得出所研究系统的量子力学结果。1967 年，Gutzwiller 计算了氢原子在动量表象下的 Green 函数的半经典表达式[101,123]。他给出的氢原子的半经典近似 Green 函数不仅给出了正确的束缚态能级，而且还给出了正确的束缚态波函数。遗憾的是，除了少数几个简单的量子系统外，计算半经典近似 Green 函数的表达式仍然是极其困难的，因为这需要将整个体系的所有周期轨道都找出来。在通常情况下，这是一项非常艰巨的工作。

20 世纪 80 年代，Du 和 Delos 在考虑磁场中的激发态原子时发展了一套与半经典的周期轨道理论相类似的闭合轨道理论[124～126]。该理论成功地解释了困扰原子物理学近 20 年的准 Landau 振荡现象。1969 年，Garton 和 Tomkins 将钡原子放在 2.4T 的磁场里，测量其从基态跃迁到具有不同能量的末态的光吸收谱时，观察到了未曾预料到的现象：①对于低激发态，无磁场时的每条谱线都分裂成几十条谱线，形成谱线簇；②对于高激发态，相邻的谱线簇开始重叠，使得谱线变得很复杂；③在电离阈附近，吸收谱变成在平坦的背景上叠加一个振荡，这个振荡（后来被称为准 Landau 振荡）一直延续到电离阈之上的正能量区。这一发现极大地刺激了人们对强场中的原子这一问题的研究，人们对这一现象的理解花了将近 20 年的时间，直到 Du 和 Delos 利用他们建立的闭合轨道理论才给出了比较满意的解释。这些研究工作把我们带

到了现代物理学所关心的一些基本问题当中[123,127]。

闭合轨道理论将磁场中原子的吸收截面作为能量的函数,表示成无磁场时的光滑吸收截面加上很多正弦振荡项,每一个振荡项都与电子在库仑场和磁场作用下的一个闭合轨道相对应。振荡项的振幅既取决于闭合轨道的稳定性,也取决于原子吸收光子以后产生的向外传播的电子波的角分布,以及闭合轨道的出射角和入射角。闭合轨道越稳定,其出射角和入射角越接近角分布的极大值,相应的振幅就越大。正弦函数的相位是波函数沿着闭合轨道传播的相位改变,其数值等于作用量沿闭合轨道的积分再加上 Maslov 修正。

这个理论与周期轨道理论的最大区别在于,后者要在体系的相空间中找到所有的经典周期轨道,而前者则只需要在位移空间中找到一个固定点,然后找到从这一点出发后又回到这一点的所有的经典闭合轨道。这意味着在处理具体问题时只需要相对少得多的计算量。

闭合轨道理论因其思想的一般性而有广泛的应用。该理论现已被用来成功地解释了负离子在静电场中光剥离截面的振荡以及臭氧吸收谱的振荡等现象,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。这一领域的研究和发展现已被称为"回归谱学"(recurrence spectroscopy)。

该理论更重要的意义在于,其思想的进一步推广可望用来描述量子跃迁的本质[128]。不严格地说,量子力学中体系从一个态跃迁到另一个态,对应于经典力学中粒子从一个点跑到另一个点。按照 Feynman 路径积分理论,两个点之间的各轨道均应一视同仁地考虑,但是,沿不同轨道所贡献的几率波的相位不同,因而会导致干涉现象。这种干涉现象使一些轨道彼此相消,而另一些轨道则大大加强了。每一个这种加强了的轨道(不一定是闭合轨道),均可以用一个正弦振荡项来表示,并对应着一个量子跃迁过程。而体系的量子谱函数作为能量的函数,可以表示成背景项加上很多正弦振荡项。这种半经典的近似方法不仅可以用来描述量子跃迁的经典本质,而且还可以在量子力学和经典力学之间架起一座桥梁,使量子力学中某些复杂的计算问题通过这种半经典近似得以大大地简化。

本书在闭合轨道理论思想的基础上提出一种新的经典-量子对应。我们定义了一个新的量子谱函数,再以一类量子小体系——二维矩形腔中的弹子球运动为例,定量地计算了所定义的量子谱函数。其后,我们还揭示了这种量子谱函数与经典轨道之间的对应关系,描述了这种量子小体系中的量子输运过程。这些量子输运过程中的经典轨道既不同于 Gutzwiller 周期轨道理论中的周期轨道,也不同于 Du 和 Delos 闭合轨道理论中的闭合轨道。另外,我们