扬州大学学位论文原创性声明和版权使用授权书

学位论文原创性声明

本人声明：所呈交的学位论文是在导师指导下独立进行研究工作所取得的研究成果。除文中已经标明引用的内容外，本论文不包含其他个人或集体已经发表的研究成果。对本文的研究做出贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本声明的法律结果由本人承担。

学位论文作者签名：张正中

签字日期：08年6月15日

学位论文版权使用授权书

本人完全了解学校有关保留、使用学位论文的规定，即：学校有权保留并向国家有关部门或机构送交学位论文的复印件和电子文档，允许论文被查阅和借阅。本人授权扬州大学可以将学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文。同时授权中国科学技术信息研究所将本学位论文收录到《中国学位论文全文数据库》，并通过网络向社会公众提供信息服务。

学位论文作者签名：张正中　　　导师签名：陈贺胜

签字日期：08年6月15日　　　签字日期：08年6月15日

摘要

随着新技术特别是微电子技术的发展，传统的电子器件已经深入到微观量级，量子效应逐步显现。因此，量子效应的出现不仅是电子器件制造面临的必须解决的问题，同样也是量子器件研究的主要方向。1993年5月，美国加州圣荷塞阿玛丹IBM研究中心的 Crommie 等人在液氮温度下，将铁原子蒸发到清洁的Cu(III) 表面，然后用扫描隧道显微镜操纵这些铁原子使它们逐个地定位在铜表面上，从而构造出这些形状各异的闭合图样，由这些原子排列而成的闭合图样即所谓的“量子围栏”. 对于处在围栏内金属表面费米态电子而言，这个由原子筑成的围栏便成了一个横向的闭合势垒，它们被束缚在势垒内形成束缚态电子，试验上，在量子围栏中可明显观察到二维电子分布在不同条件下的驻波图样，这也是微观粒子具有波动性的一个直接证明。

在理论上，我们可以采用量子台球系统来近似“量子围栏”，通过研究量子台球系统的本征行为来研究处于“量子围栏”内部的束缚态表面电子的特征行为。对各种量子台球系统的研究是一个过去研究较多的课题，因为一般的量子台球系统都是不可积系统，一般都是通过各种数值、近似方法进行研究计算。本文中，笔者主要采用了一种较为有效的计算闭合深势阱量子系统本征行为的数值计算方法——边界积分方法（Boundary Integral Method 简称 BIM)。该方法在分析计算上，传统的作法一般存在着对本征值判断粗糙、精度差的问题，笔者通过引入一种改进的判断条件“边界残量”，从而达到了有效的提高判断精度和提高计算效率的目的。另外，为了通过引入“边界残量”和波函数分布关联度的概念，我们解

决了计算系统简并度的问题，实际的计算结果显示，我们提出的方法非常简单有效，这为研究其他复杂边界的量子台球系统提供了一种可行的路径。

笔者利用改进了 BIM 方法分别求解研究了 Sinai 台球模型系统和 1/4 Sinai 台球系统内电子的本征能级和本征态波函数。一般认为，由于对称性的原因，Sinai 台球和 1/4Sinai 台球有着几乎相同的物理性质，出于简化计算量的考虑，故一般只须研究 1/4 Sinai 台球即可得到对整个台球的物理特征的描述。但我们的计算结果显示，由于 Sinai 台球系统和 1/4 Sinai 台球系统有着不同对称性，虽然两者在经典行为上是完全一致的，但在微观下，两者的本征行为还是存在较大的差异，从对称性上来说，1/4 Sinai 台球系统的本征态只是 Sinai 台球系统的子集，Sinai 台球系统的很多本征态在 1/4 Sinai 台球系统上是不存在的。我们计算结果说明，Sinai 台球在高能态下的能谱结构以及本征态波函数要比 1/4 Sinai 台球系统复杂的多，这说明，利用 1/4 Sinai 台球系统的研究结果来推测 Sinai 台球系统的量子行为不是一个好的方法，这里遗漏了许多 Sinai 台球系统所独有的特征行为。

在文章的最后，笔者模拟了圆型围栏，方型围栏和椭圆行围栏内的电子波函数分布，得到了很多与试验上符合极好的结果。但在试图用类似方法模拟椭圆台球内部的“量子鬼影”时，没有观察到期待中应该出现的对称映像。笔者认为，这与用利用台球系统进行简单近似有关，后期工作我们准备利用有限高势垒近似更加逼近实际的“量子围栏”，期待可以重现在椭圆焦点上出现“量子鬼影”现象。

本文通过应用改进的 BIM 方法研究了几种二维台球系统的本征行为，并用台

球系统近似模拟了不同形状的量子围栏内表面电子态分布，有助我们对试验中所观察到的现象加以理解，了解这类系统的微观行为特征。笔者希望通过我们的工作，能为以后关于量子围栏和量子点的工作提供一些借鉴和参考。

关键字：量子台球，量子围栏，表面态波函数，本征态

Abstract

With the development of new science and micro-electronics techniques, the traditional electron device can be made more and more smaller, even into the micro-cosmic field. The quantum effect generally stands out in such circumstance and can not be ignored. Sometimes this problem is not an important embarrassment which the manufacturer should over come but a interest research domain. In May of 1993, the Crommie and his group use STM equipment fix several iron atomics on the Cu (III) surface with help of liquid nitrogen. These iron atomics get together in a circle which made it like a barrier, and then the scientist found the visible diffraction design in it which made by the electron. This system is called quantum corral because the electron was confined in a tiny barrier construct by the inner iron's electrons. It is a forcefully evidence which can prove the micro-article's fluctuate property.

In theory, we can use a quantum billiard system to simulate .quantum corrals and the distribution of wave function can be regarded as the distribution of electron in quantum corrals. In this paper, the Boundary-Integral Method (short for BIM), which is a powerful method for solve the eigen problem of quantum billiard system, is adopted and some improvements were introduced to enhance the numerical efficiency and accuracyn. By using new defined quantization measure

for BIM, eigen-energies can be determined accurately and quickly. In this paper, a simple and efficient definition, correlation function about wave function, is introduced to determine the degenerate degree of eigen-states. These new improvements can provide a new accesses for the future work in this field.

By use the new quantization measure for BIM, the writer simulate two kinds of billiards system: the Sinai billiard and the 1/4 Sinai billiard. The past work believed that both of the Sinai billiard and the 1/4 Sinai billiard have the same physics property. But our result suggest, there are existed some eigen-states in the Sinai billiard system which are not eigen-states in the 1/4 Sinai billiard. The set of all eigen-states of 1/4 Sinai billiard is only the subset of Sinai billiard. The reason should be the difference of spatial symmetry between two systems. that is to say, we can't simply regard the 1/4 Sinai billiard as the 1/4 part cutted from Sinai billiard. In addition, the write find that the Sinai billiard's wave function of high eigen-state is more complex than the 1/4 Sinai billiard.

In the 4th sector of this paper, the author use BIM to calculate the electron-wave distribution respectively in circle quantum barrier and ellipse quantum corral, the numerical result matches well with the published experimental result. But the result of simulation in the ellipse quantum corral with a small circle wall on its right focus point is not the expected one of published experiments. Maybe it is caused by using a small circle wall to approximate a atom

at the focus, the approximate is rough. In the following, we will replace the small circle wall with a circle finite stepped potential, we expect to find the atom's "quantum ghost" at another focus, the phenomena has been found in published experiment.

Key words: **quantum billiard, quantum corral, surface electron-wave distribution, eigen-energies**

第一章： 绪 论

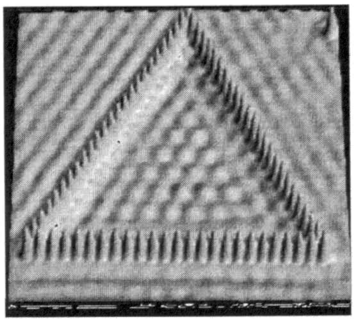
1.1 引言

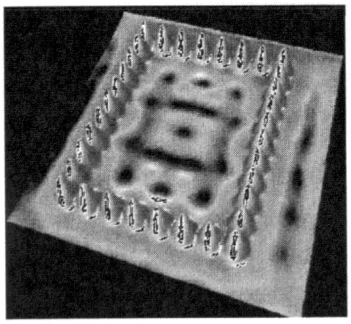
自有人类文明以来,人们就一直为探索宏观宇宙世界和微观物质结构世界的奥秘而不懈努力。而对于微观世界的研究，由于受限于当时的观测手段，直到近代，才出现了迅速的发展。1674 年,荷兰人列文虎克(A. Van. Leeuwenhoek) 发明了世界上第一台显微镜,首次观察到血红细胞,为人类打开了丰富多彩的微观世界大门，到了19世纪中叶，通过原子的散射试验，人们也开始在原子的尺度上认识我们身边身边的微观世界，20世纪70年代末，扫描隧道显微镜（STM）的诞生更是使人类从直观上观察到了原子尺度下的世界，使人类对微观世界的观察能力一下子飞跃到千分之一的纳米级，并使人类可以在原子尺度下自由地操作特定原子，这些技术在提高人类认识世界能力的同时，也大大刺激了微型电子器件和微加工技术的迅猛发展。通过新的半导体工艺和加工技术，人类开始进入纳米时代。

扫描隧道显微镜（STM）的诞生是人类对原子世界进行研究的一个突破，它不仅可以用来观察原子的分布，还可以实现在二维平面上对原子进行搬迁。在STM的探针针尖上加很微弱的电流,就会在针尖上产生一个梯度电场,当原子与针尖的距离非常接近(距离为几十纳米) 的时候会，就会互相吸引,这时把针尖提起,针尖就能够从样品表面吸取一个孤立原子并转移到别处,然后撤去电场,就可以将原子放置到新的位置上,从而实现原子和分子的搬迁。1993年5月，美国加州圣荷塞阿玛丹IBM研究中心的Crommie 等人在液氮温度下,将铁原子蒸发到清洁的Cu(III) 表

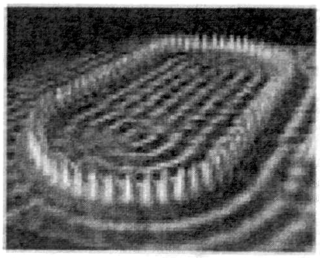
面[1]，然后用扫描隧道显微镜操纵这些铁原子使它们逐个地定位在铜表面上，从而构造出这些形状各异的闭合图样，由这些原子排列而成的闭合图样即为所谓的“量子围栏”[2]. 对于处在围栏内金属表面费米态电子而言，这个由原子筑成的围栏便成了一个横向的二维势垒，电子被束缚在势垒中。由于微观电子的波动性，在量子围栏中，可以明显地观察到电子分布的驻波形式. 这是微观粒子具有波动性的直接的实验证明。

由于量子搬迁技术，人们可以随意的用STM改变围栏的形状，于是，又诞生各种不同外型的量子围栏：有三角的，椭圆的，矩形的台球型的量子围栏。





其中，值得一提的主要是运动场型的量子围栏和椭圆量子围栏。运动场型的量子围栏，由于其边界的特殊性，决定了其电子波函数的分布特性可以由运动场边界的量子台球系统来模拟。同时，二维运动场量子台球模型是过去人们用来研究量子混沌常用的模型之一。这就为实验上研究观测混沌现象提供了一条切实的途径。



说起量子混沌，我们得回顾一下对混沌科学发展的历史。早在 100 多年之前的玻尔兹曼在推导他的著名的 H 定理时，就曾经提出过分子混沌的假设。但那时的混沌一词只是被用来表示与宏观系统统计性质有关的无序特征。而到了 19 世纪末，著名的数学家庞加莱在研究三体问题的稳定性的时候发现，即使是只有两个自由度的保守系统也能做出难以想象的复杂运动。虽然他没有使用混沌这个词，但从现在看来，三体问题就是一个典型的混沌问题。1963 年，气象学家洛仑兹发表了他用数值方法研究的大气热对流模型方程时发现的确定性非周期流。1964 年，天文学家埃农和海耳斯在关于星系中星体轨道的数值研究中，再次发现了当年庞加莱用定性方法研究过的保守系统的中不规则运动。70 年代以后是混沌科学的蓬勃发展时期。混沌科学已经引起专家学者的广泛关注，混沌已经对自然科学，社会各个领域产生重大影响。

在认识到混沌在经典力学中的重要地位之后，人们很自然地会想到确定性混沌的概念推广到量子力学中去，量子混沌是 70 年代出现的量子力学研究中的一个新方向。其目标是要弄明白，在经典世界里极为普遍的混沌现象，在量子世界里会有什么样的表现形式。经过二十多年的研究，人们从能谱统计描述，定态波函数的形式等各种量子现象中，辨认出了一系列与经典混沌有关的行为特征。其中

某些特征，已在实验中被观测到，为了从理论上阐明这些特征，人们还建立了一套半经典理论，这一理论推广了玻尔－索末菲的旧量子理论，把混沌系统的量子力学行为与其经典的周期轨道行为联系在了一起。事实上，按照玻尔的对应原理，将量子力学应用到宏观运动上所得到的结果。应该与经典力学的结果一致，力学系统的混沌特征，也必然在其量子性质上有所表现。进入80年代，讨论量子混沌的文献[3,4,5]数量迅速增长，其大部分文章都致力于阐明经典混沌系统对应的量子系统所具有的特征。

对于经典可积的量子系统已有不少研究,最早的是周期驱动的振子KR[6,7]。对比较简单的经典混沌系统对应的量子系统的混沌行为具有很大的兴趣,这对于进一步清楚地研究经典混沌系统所对应的量子力学系统具有重要的意义，在许多光学和微波实验上有了很好验证[8,9]。Baowen Li, Banbi Hu 等在台球系统的经典和量子行为均已有不少研究，如混沌扩散行为,经典局域化现象,不稳定周期轨道疤痕等，这方面做出了巨大贡献[10,11,12]。台球系统是上个世纪80年代以后在量子非线性领域广为研究的系统，对于不同边界形式的台球系统的经典及量子行为的研究工作已经作了许多。对静态的台球系统,许多研究表明其经典和量子的混沌有很重要的对应性[13]。

在这种背景下，笔者首先改进了一种数值构造闭合系统驻波态的数值方法，然后计算了和比较了Sinai 台球系统和1/4Sinai台球系统在这种数值方法的物理性质。并且，笔者将量子围栏近似成闭合台球系统相同的边界条件，同样借助边界积分数值方法构造了原形，椭圆型，运动场型和矩形量子围栏的表面态波函数，

开展了大量数值模拟工作。

1.2 参考文献

[1]M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler *Science* 262, 218-220 (1993).

[2]M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler. *Nature 363, 524-527 (1993).*

[3] 陆同兴：非线性物理概论[M]

[4] H. Jirari, H. Kröger, S.G. Rubine et al. Quantum instantons and quantum chaos

Phys. Lett. A 2001, 281：1－8

[5] 赵春风,羊亚平,冯伟国.非线性物理简介:7.量子混沌[J]. 工科物理, 1997, 第2期

[6] G Casati et al, Stochastic Behavior in classical and quantum system[M], Vol 93,Lect. Notes. in Phys(Springer,Berlin 1979)

[7] G Casati et al. Dynamical Stability of Quantum "Chaotic" Motion in a Hydrogen Atom[J]. Phys. Rev. Lett.. 1986, 56(9)：2437~2440

[8] Kudrolli A, Kidambi V V, Sridhar S. Experimental Studies of Chaos and Localization in Quantum Wave Functions[J]. Phys Rev Lett., 1995 75(5)：822-825； Dionne, Gregory E.; Liboff, Richard L. Waveguide experiment related to field chaos[J]. Phys. Lett. A, 204：174-176

[9] Doron Cohen and Diego A. Wisniacki. Stadium billiards with moving walls[J]. Phys Rev E 2003, 67：026206-1~026206-14

[10] Baowen Li, ROBNIK M, HU B B. Relevance of chaos in numerical solutions of quantum billiards[J]. Phys. Rev. E, 1998, 57: 4095~4105

[11] Baowen Li and Bambi Hu. Statistical analysis of scars in stadium billiard[J].

http://arXiv:cond-mat/9712082 1997: 1-28

[12] Baowen Li. Numerical study of scars in a chaotic billiard. Phys. Rev. E, 1997 55: 5376-5379

[13] 何红波,王文军.边界振动的圆形弹球系统的量子混沌[J].河南科学,2000,18(1):36-40

第二章：利用边界积分方法研究二维无限高闭合方势垒的本征解

2.1.研究背景

随着半导体技术和微加工技术的日新月异，微器件的尺寸已经进入纳米尺度。由于工程技术的需要，通过新的半导体工艺和纳米加工技术，人们已经可以实现将几个原子或几个电子束缚在一个小尺寸的量子阱内，从而形成新的光学或电学器件。对该类系统的输运性质及本征问题的研究，有助于对量子信息领域中已些理论上亟待解决的问题加以解释以及对一些微观物理现象加以理解，如量子点的性质、量子围栏的性质[1,2]、纳米器件的输运性质[3]等等。具有硬边界的闭合无限高方形势垒系统是对这类问题的最简单近似，研究闭合无限高方形势垒的本征行为显然对此类问题的理解具有很现实的理论价值。

量子台球系统是典型的二维闭合无限高方形势垒系统，除少数具有特殊边界的经典台球系统作规则运动外，一般的经典台球系统都作遍历混沌运动[4]。对量子台球系统的研究工作开展很早，最初的研究是为了讨论不可积系统中出现的量子混沌行为，通过对经典混沌系统所对应的量子系统的本征能谱和本征态的统计行为和动力学行为的研究，以期望给出可积系统和不可积系统本征行为之间的差异[5,6,7]。近期，在这个领域的研究工作也较多[8,9]。

目前，计算二维无限高闭合方势垒系统的的工作已有很多[10,11]。其中，求解本征解的方法有边界积分方法(BIM)、平面波展开方法(Plane-wave Decomposition Method,简称 PWDM)[11]和定态展开法(Expansion Method of Stationary State,简称 EMSS)[11,12]等。在本文中，我们主要采用 BIM 方法，

一次性地精确求解了二维量子台球系统在给定能量范围内的所有本征能谱。在利用 BIM 求解的过程中，通过我们引入的关联度函数，避免了传统 BIM 方法在求解过程中可能出现的多根问题，同时也解决了简并态的求解问题。

2.2. 量子台球系统的简化

台球系统即将一个粒子束缚在一个闭合的具有特定硬质边界的二维盒子中自由运动，忽略边界与粒子之间的能量交换，并将盒子的硬质边界理解为无穷高势垒。台球系统是典型的二维闭合无限高方形势垒系统，对于低能态粒子，如果粒子运动的德布罗意波长与二维盒子的尺寸相近时，粒子运动的量子行为表现将极为明显，而高能态的粒子，由于其德布罗意波长较短，粒子在台球场内的运动与经典粒子的运动类似。常见的几种规则边界的台球系统如图(1)，其中圆形台球系统和矩形台球系统为典型的可积系统，其本征方程存在严格的解析解，而图(1)中的（b）为不可积 Sinai 台球系统，其本征方程不存在严格的解析解，在特定的参数下，可以采用微扰法求解或采用数字方法求近似解。

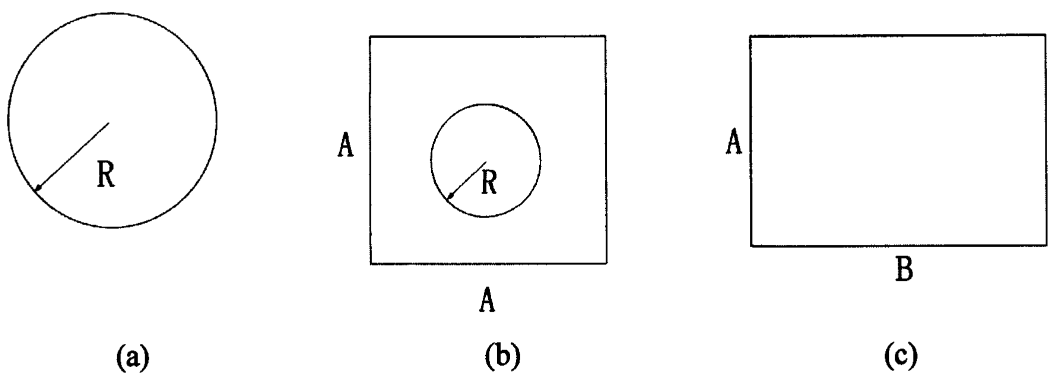


图 1. 台球模型系统

如图 1.(a),(b),(c)分别是圆形,Sinai 台球还有矩形边界的台球系统,在台球边界的内部无势场,在台球外侧则是无穷高势垒.Sinai 台球的内部小圆里也是无穷高势垒。(a)和(c)都是典型的可解析系统，(b)是典型的不可积系统。注意,上图中的 R, a 和 b 都是无标度的.

量子台球系统的哈密顿算符为：

$$\hat{H}=\frac{\hat{P}^2}{2m}+V(\hat{x}) \tag{1}$$

这里，$V(\vec{x})=\begin{cases}0,(\vec{x}\text{在台球场内})\\ \infty,(\vec{x}\text{在台球场外})\end{cases}$，定态薛定谔方程可以表示为：

$$\hat{H}\psi(\vec{x})=E\psi(\vec{x}) \tag{2}$$

只有少数具有特定边界的台球系统的定态薛定谔方程可以严格求解，而一般非可积量子台球系统只能借助于数值方法或微扰方法进行求解，本文采用的 BIM 方法就是一种非常有效的数值方法。

在台球场内，式(2)可以表示为 Helmholtz 方程：

$$\nabla^2\psi(\vec{x})+k^2\psi(\vec{x})=0 \tag{3}$$

这里 $k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$，对于量子台球系统，方程式(3)采用第一类边界条件，及 Dirichlet 边界条件：$\psi(\vec{x})\big|_s=0$。

2.3.边界积分方法的理论研究和改进工作

求解式(2)定态薛定谔方程的解，我们可以采用格林函数方法求解。对于自由粒子，定义自由粒子的格林函数 $G(x,x')$ 为：

$$(-k^2-\nabla^2)G(k;x,x')=\delta(x-x') \tag{4}$$

自由粒子的格林函数解为：：

$$G(k;\vec{x},\vec{x}')=-\frac{1}{4}Y_0(k\left|\vec{x}-\vec{x}'\right|)+\varphi(\vec{x},\vec{x}') \tag{5}$$

这里，$\varphi(\vec{x},\vec{x}')$ 是规范自由度，为满足规范要求 $(-k^2-\nabla^2)\varphi(\vec{x},\vec{x}')=0$ 的任意函数，这里我们采用最简单的处理方式，令 $\varphi(\vec{x},\vec{x}')\equiv 0$。由格林函数，台球系统的本征态函数可以表示为：

$$\psi(\vec{x})=\int G(k;\vec{x},\vec{x}')\rho(\vec{x}')d\vec{x}' \tag{6}$$

这里，$\rho(\vec{x}')$ 理解为在台球场内形成场 $\psi(\vec{x})$ 的源分布密度，对于量子台球系统来说，源 $\rho(\vec{x}')$ 只分布于台球系统的边界上，则式(6)可以表示为：

$$\psi(\vec{x})=\oint G(k;\vec{x},\vec{x}_s)\Phi(\vec{x}_s)ds \tag{7}$$

这里的下标 s 表示沿边界积分，$\psi(\vec{x})$ 要求满足 Dirichlet 边界条件 $\psi(\vec{x}_s)\equiv 0$。利用数值方法进行计算时，可以将式(7)中的积分表示成求和式：

$$\psi(\vec{x})=\Delta S\sum_{s}G(k;\vec{x},\vec{x}_s)\Phi(\vec{x}_s), \tag{8}$$

这里 $s=1,2,3\cdots\cdots N$，表示将边界均匀离散为 N 个离散点，ΔS 为离散后任意两边界点之间的边长。若粒子运动的德布罗意波长为 $\lambda=2\pi/k$，将边界均匀离散为 N 个离散点要求 $\Delta S\ll\lambda$。显然，N 越大，ΔS 越小，数值误差就越小，但同时要求的计算量也与 N^2 成正比增长，若 N 过小，数值误差就越大，实际计算中会出现大量丢解的情况，在实际计算中，我们一般取 $\Delta S\approx\lambda/3$，这样可以基本保证解的完整性。边界离散后，Dirichlet 边界条件可以表示为：

$$\sum_{s'} G(k;\vec{x}_s,\vec{x}_{s'})\Phi(\vec{x}_{s'}) \equiv 0 \text{。} \quad (9)$$

由式(9)定义 Fredholm 矩阵：

$$A_{ij}(k) = G(k;\vec{x}_i,\vec{x}_j) \quad (10)$$

式(9)可以表示为：

$$\sum_j A_{ij}(k)\Phi_j = 0 \text{，} \quad (11)$$

为了便于计算，这里取$i,j=1,2,3...N$，则 Fredholm 矩阵A为$N\times N$的方阵。很显然，并不是任意的k都能满足式(9)，对于处于束缚态的台球系统，只有k在本征态时，才有满足式(9)的$\Phi(\vec{x}_{s'})$，此时的粒子能量即为本征能量。

为了寻找满足式(9)的k值，可以采用奇异值分解(Singular Values Decomposition, SVD)方法来确定$\Phi(\vec{x}_{s'})$在给定k值时的最优解，使得由式(8)所表达的$\|\psi(x)\|$沿边界有最小值。当系统处于本征态时，$\|\psi(x)\|$沿边界值为 0。对给定的k，对A作 SVD，得：

$$A(k) = u(k)W(k)v(k) \text{，} \quad (12)$$

W为对角阵，对角元为A的奇异值，u矩阵的行矢、v矩阵的列矢分别为对应奇异值的左矢和右矢，根据奇异值的定义，这里将右矢理解为源在边界上的分布密度$\Phi(\vec{x}_{s'})$。为了在数值上寻找满足式(9)的解，这里需要定义一个判据，用来判断k在取何值时，存在$\Phi(\vec{x}_{s'})$使得式(9)严格成立。通常意义下，一般采用 SVD 的最小奇异值作判据，但通过我们的实际操作，这个判据并不是一个好的判据，存在一些操作上的困难。我们重新定义了一个新判据——边界残量，边界残量的定义为：

$$T(k)=\frac{1}{B}\Delta S\sum_{s}(\psi_s)^2=\frac{1}{B}\Delta S\sum_{s}\sum_{s'}(G(\vec{x}_s,\vec{x}_{s'})\Phi(\vec{x}_{s'}))^2。\tag{13}$$

这里的B为$\psi(\vec{x})$的归一化常数。显然，当$T(k)=0$时，$\psi(\vec{x})$即为系统的本征态函数，而$E=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$即为系统本征能量。在数值上，我们扫描给定区域的k，对$A(k)$做SVD分解,最后作（$T(k),k$）函数图。在（$T(k),k$）函数图上，所有$T(k)$出现极小的地方近似为系统本征态的位置，这样就可以最终给出给定区域内的所有本征能谱。

对于高维量子系统，出现状态的简并是非常普遍的情况，完全确定简并态对于了解系统的量子统计性质以及利用微扰法计算系统的物理量等都具有实际的意义。对于量子台球系统，我们处理简并态问题还是基于BIM方法。若某个能级i为n度简并，则定义SVD的每个右矢量的边界残量为$T_j(k_i)=0\quad,j=1,2,\cdots\cdots,n$。在$k_i$附近，至少存在$n$个波函数$\psi^j(\vec{x})$的边界残量同时趋近于0，也即在$k=k_i$时，存在$n$种源分布$\Phi^j(\vec{x}_s)$所构造的波函数满足 Dirichlet 条件，这里关键是如何同时寻找出所有的$\Phi^j(\vec{x}_s)$。实际计算时，首先，我们还是利用BIM方法计算所有的能级，在确定本征能级以后，针对每个能级都作一次简并态分析。为了区分简并的不同波函数，我们引入了波函数间的关联度函数：

$$C_{ij}=1-\left|\frac{\int(\psi_i(\vec{x})-\psi_j(\vec{x}))^2\,d\vec{x}}{\int|\psi_i(\vec{x})|^2\,d\vec{x}+\int|\psi_j(\vec{x})|^2\,d\vec{x}}\right|,\tag{14}$$

若$\psi_i(\vec{x}),\psi_j(\vec{x})$为相同的波函数，则$C_{ij}=1$，若$\psi_i(\vec{x}),\psi_j(\vec{x})$为不同的正交本征态波函数，则$C_{ij}=0$。对于束缚态，定态波函数的关联度函数也可以表示为：

$$C_{ij} = \left| \frac{\int \left(\psi_i^*(\vec{x})\psi_j(\vec{x}) + \psi_i(\vec{x})\psi_j^*(\vec{x}) \right) d\vec{x}}{\int |\psi_i(\vec{x})|^2 d\vec{x} + \int |\psi_j(\vec{x})|^2 d\vec{x}} \right| = \left| \frac{2\int \psi_i(\vec{x})\psi_j(\vec{x}) d\vec{x}}{\int |\psi_i(\vec{x})|^2 d\vec{x} + \int |\psi_j(\vec{x})|^2 d\vec{x}} \right| 。 \tag{15}$$

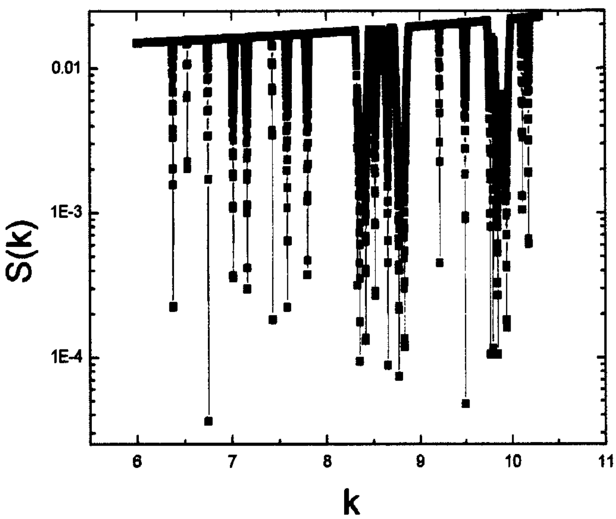
实际计算时，在特定的本征能级$E(k_i)$，对 Fredholm 矩阵A作 SVD，并利用$T^j(k_i)$作判据，选取边界残量较小的右矢量$\vec{v}$作为可能的Φ。这里需要说明的是，在作 SVD 时，由于不同的简并态所对应的最小奇异值趋近于 0 的速度不同，数值上不能保证所有的简并态在作 SVD 时都能使得$T(k_i)$同时趋于极小量，所以，相对于求解本征能级，在求解简并态时我们对$T(k_i)$范围有比较大的宽容度。最后，对所有选取的$\Phi(\vec{x}_s)$，作关联度分析，给出所有非关联的简并态波函数。

2.4. 改进后 BIM 方法的数值计算结果

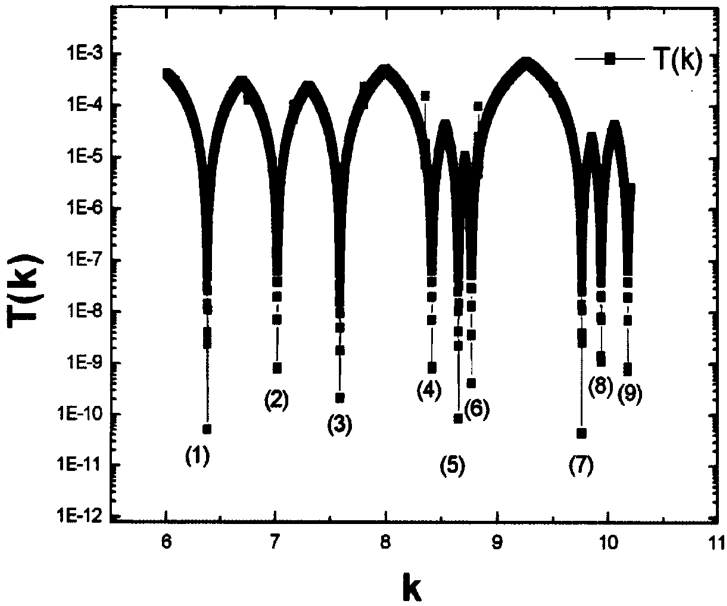
2.4.1 圆形量子台球系统的本征能谱

圆形量子台球系统是少数可以严格求解的二维无限高方形势垒量子系统，为了验证方法可行性及可靠性，我们利用 BIM 方法计算了图 1(a)中圆形量子台球系统的本征谱，这里台球场的半径$R=1$。在计算时，我们分别采用了最小奇异值和边界残量作判据来确定本征能级的位置，图 2 中(a)、(b)图 分别为采用这两种判据给出的$k\in[6.0,10.0]$区间内$T(k)$的函数图，表 1 罗列出了利用$T(k)$所找到的本征能级，同时也对照着给出了理论值，利用 BIM 方法给出的结果与理论值基本吻合，可以看出，利用$T(k)$作判据搜寻系统的本征能量是非常有效的。同时对比图 2 中的(a)图和(b)图，可以看出，如果简单利用最小奇异值$S(k)$作为判据搜寻本征

能级，则结果要远远多于实际的能级数，所以，单纯利用最小奇异值作为判据来确定本征能级的位置并不是非常有效，会出现许多过余的“伪解”。针对这种情况，我们也考虑过利用$S(k)$并结合关联函数C_{ij}共同确定本征能级，实际的结果说明这种操作非常有效的，这里我们不再详细描述。最后，我们给出圆形台球系统在低能态的能级累计密度的解析解与数值解的对照，如图 3，可以看出，两者吻合的非常好。



(a)



(b)

图 2.用两种不同的标准寻找本征能级

如图 2, 在$k\in[6,10.2]$区间内，(a)：最小奇异值 S(k)随k的变化曲线；(b) 边界残量$T(k)$随k的变化曲线，理论上在此区间存在 9 个能级，这与(b)图精确吻合，而(a)图显然存在过多的“伪解”。

表 1.图 2（b）中最小边界波函数残对应的 k 空间本征态的值

	（1）	（2）	（3）	（4）	（5）	（6）	（7）	（8）	（9）
解析解	6.8301	7.0156	7.5583	8.4172	8.6537	8.7715	9.7601	9.9361	10.1375
数值解	6.8302	7.0164	7.5585	8.4176	8.654	8.7718	9.7606	9.9362	10.1378

图 3.中 ，在能量区间$2mE/\hbar^2\in[0,300]$内，我们计算得到的圆形台球系统的能级累计密度与理论解的对照图，两者基本吻合。

表一1，.利用图 2 (b)，可以寻找$k\in[6,10.2]$区间内的所有本征能级，表中罗列出了这个区间内的所有本征能级的数字解和理论解，两者之间基本吻合。

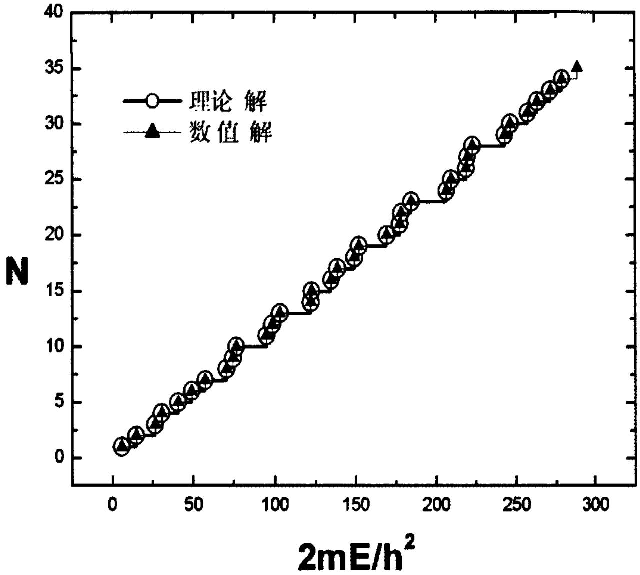


图 3.用改进后的方法计算能级累计密度

2-4-2 简并态的数值结果

为了验证简并态计算方法的有效性，我们选取了类似于图 1(c)的量子矩形台球系统作为研究对象，这里取$A=2.0,B=4.0$。量子矩形台球系统是少数有严格解的可积系统，矩形台球系统在高能级时存在大量的简并情形，这为我们对照性的研究带来了很多便利。

首先，通过理论计算得$k\approx 12.268$为矩形台球系统本征能级的位置，且为二重简并态，我们以此能级为例，验证算法的可靠性。首先，选定$k\in[11.95,12.69]$区间内，利用式(10)计算得到$T(k)$函数图，如图 4 所示。这里，我们选取了三个本征能级$k=11.998,12.268,12.664$，对每个能级，计算 SVD 所有右矢的边界残量$T^j(k)$并作出大到小的排序，如图 5 所示。当k为12.268和12.664时，$T^j(k)$在趋于最小

时，都存在一个小平台，在平台上，$T(k)$缓慢地趋于最小，而且平台的宽度随简并度的加重而展宽；而对于$k=11.998$，$T^j(k)$最后突然的掉落到最小。理论计算表明，$k=12.664$和$k=12.268$时，系统存在多重简并情形，而$k=11.998$不存在简并。对于多重简并地情形，在作 SVD 时，就存在多个奇异值趋同时近于 0，同时也存在多个右矢的$T(k)$趋近于 0，这就是在图 5 中所看到的最后的小平台；而对于非简并情形，理论上只存在一个右矢的$T(k)$趋近于 0，但在实际的计算时，有可能存在几个都同时趋近于 0 的情形，我们分析了这种情况，发现这几个右矢是完全相似的源分布，实际对应着同一个状态，之所以产生这样的情形，是由于数值误差造成的，在增加边界离散点的个数后，这种“伪简并”情形会逐渐消失。

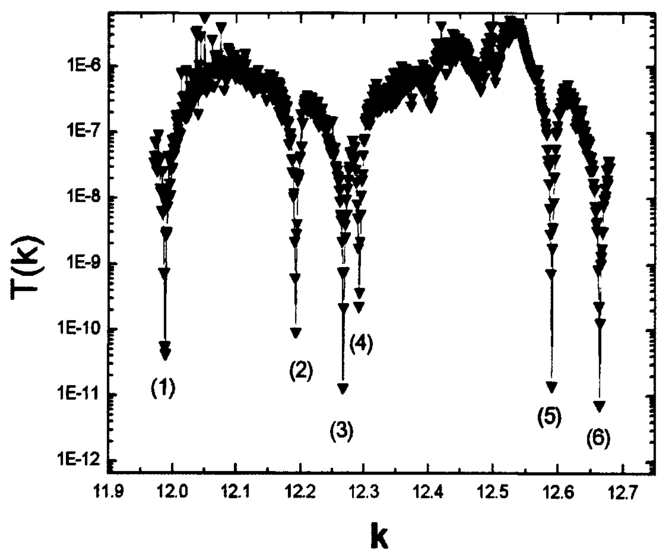


图 4.数值模拟得到矩形台球内部分本征能级

在上图 4 中，对 矩形台球系统$k\in[11.95,12.69]$区间内,最小边界残量 T(k)随 k 的变化曲线，对应的 6 个下降峰为系统本征的本能级位置，与理论解精确吻合。

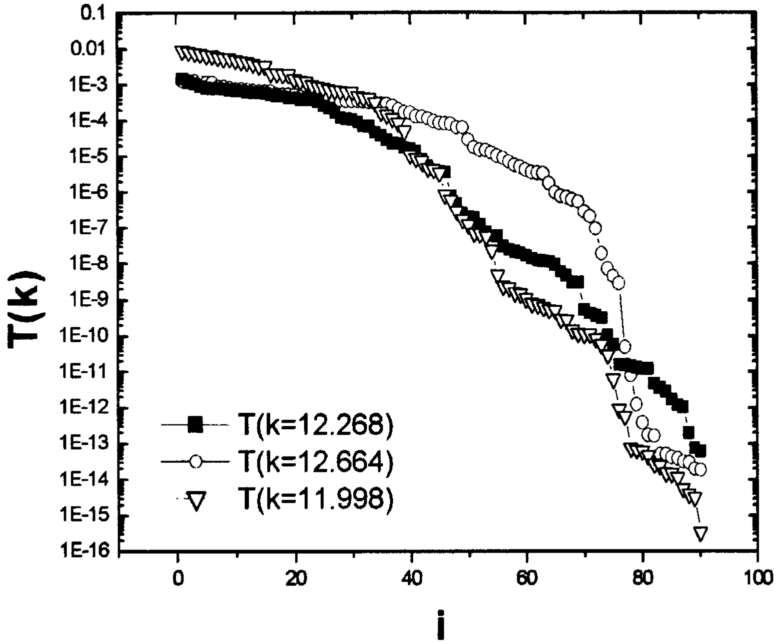


图 5.三个不同能级边界残余量收敛过程的比较

图5中，对给定的k，SVD所有右矢的边界残量$T(k)$作出大到小排序，k=11.998的$T(k)$最后突然地下降到最小，而$k=12.268$和$k=12.664$都是在一个小平台上缓慢地趋于最小，$k=12.268$和$k=12.664$存在简并情况。

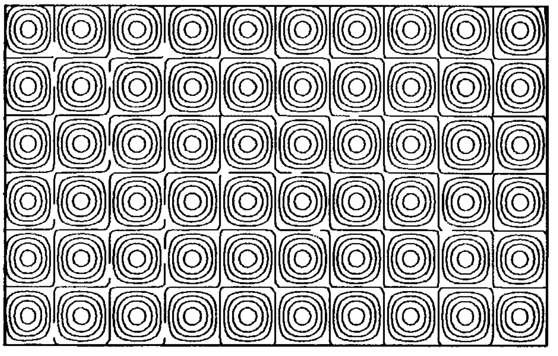
对$k=12.268$，由图-5选出$T(k)$趋于0时的小平台上的三个点，将其对应的右矢对应为源分布Φ并构造出相应的波函数$\psi^{i}(\vec{x})$，对这些波函数作关联性分析，表二列出了这三个波函数之间的关联度，从三者之间的关联度可以看出，$\psi^{1}(\vec{x})$和$\psi^{2}(\vec{x})$实际上是相似的同一个波函数，$\psi^{2}(\vec{x})$是独立的波函数，所以，$k=12.268$是二重简并态，图－6 给出了这两个简并态的波函数空间分布图。我们也分析了$k=12.664$的本征态，说明$k=12.664$是四重简并。表－3 列出了所有$k\in[11.95,12.69]$区间内的本征态位置并及简并情况的严格解，我们的计算结果与理论结果基本吻

合。

表 2，在 k=12. 268 时，选出 SVD 右矢的边界残量$T(k)$趋于 0 时小平台上的三个点，表中为其对应的三个波函数之间的关联系数。

	ψ_1	ψ_2	ψ_3
ψ_1	1.0	0. 969712	2.1217E-2
ψ_2		1.0	9.3711E-3
ψ_3			1.0

A=20



A = 2.0

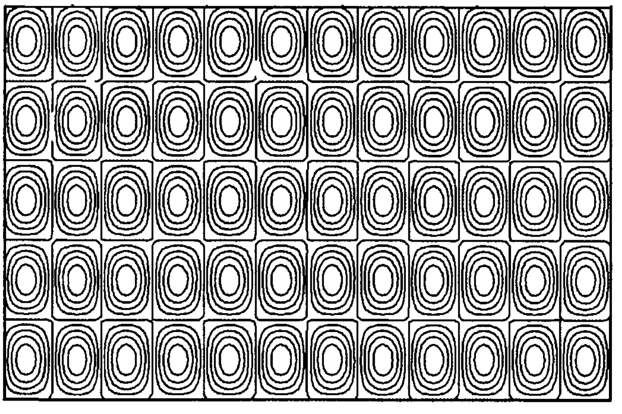


图 6，k=12.268 时，计算出的两个简并态波函数空间分布。

表 3. 对于矩形台球系统，在$k\in[11.95,12.69]$区间内，表中为所有的本征态位置和简并情况

Table.3 The finded degenerate eigen-states in Fig.4 while $k\in[11.95,12.69]$

	（1）	（2）	（3）	（4）	（5）	（6）
解析解	11．98858	12.19266	12.26831	12.29343	12.59089	12.66416
数值解	1.9886	12.1927	12.2683	12.2934	12.5909	12.6640
简并度	1	1	2	1	1	4

图 7，k=12.664 时，计算出的四个简并态波函数空间分布等高图

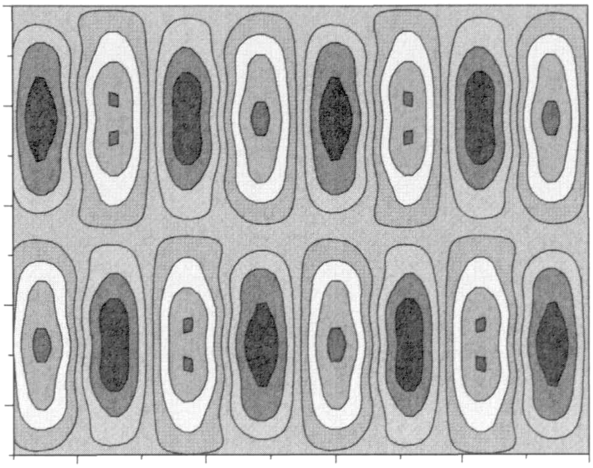


图 7（a）

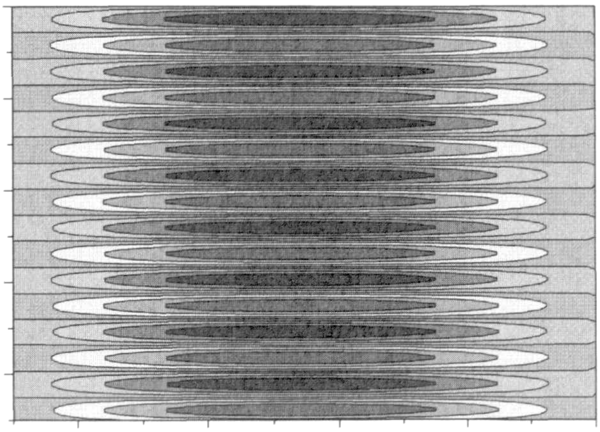


图 7（b）

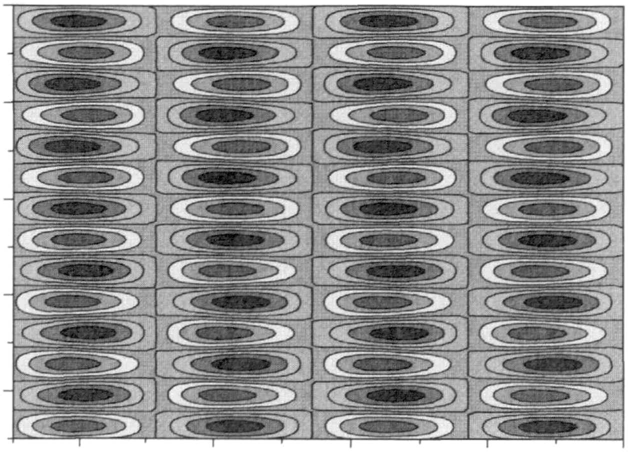


图 7（c）

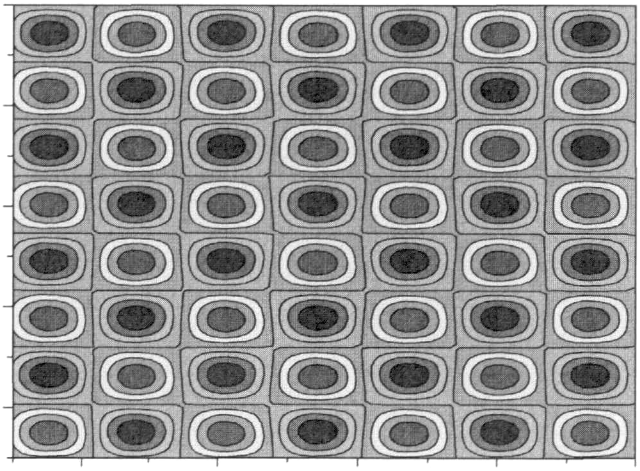


图 7（d）

2.5. 结论

本文利用 BIM 方法讨论了二维无限高闭合方势垒量子系统本征问题的求解。在传统的 BIM 方法中，由于一般都直接采用 SVD 的最小奇异值作为寻根判据，在

实际的计算中往往出现大量的“伪解”，特别是在高能态时，这种情况就更为严重，在此基础上必须再引入其他的辅助判断条件，才能较为准确的给出合理的本征能量，这给实际的计算带来极大的不便。我们重新定义了边界残量$T(k)$作为寻根判据，用$T(k)$作为判据可以直接精确地给出本征能量的位置。在 BIM 方法基础上，我们引入了波函数的关联函数，利用关联函数可以准确求解存在简并态能级的不同简并态波函数。

我们分别选择了圆形台球系统和矩形台球系统作为研究和验证对象，利用 BIM 方法计算了本征谱和简并态，我们的结果与理论结果精确吻合。以此为基础，我们希望将现在的工作做一定的拓展，如求解复杂边界量子系统的本征行为和开放系统的输运行为等。

2.6. 参考文献

[1]M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler *Science* 262, 218-220 (1993).

[2]M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler. *Nature 363, 524-527 (1993).*

[3]S. Datta. " Electronic Transport in Mesoscopic Systems" . (Cambridge Univ Pr 1997).

[4]H.J. Stockmann. " Quantum Chaos : An Introduction" . (Cambridge Univ Pr 1999).

[5]O. Bohigas, M. J. Giannoni, and C. Schmit. Characterization of Chaotic Quantum Spectra and Universality of Level Fluctuation Laws. Phys. Rev. Lett. 52 (1984), 1 - 4

[6]D. Wintgen and H. Marxer. Level statistics of a quantized cantori system. Phys. Rev. Lett. 60 (1988), 971-974

[7]T. Yukawa. New Approach to the Statistical Properties of Energy Levels. Phys. Rev. Lett. 54 (1985), 1883-1886

[8]BORGONOVI F, CASATI G, LI B W. *Phys Rev Lett,* 1996, 77: 4744～4747.

[9]Casati G, Prosen T. *Phys D,* 1999, 131: 293～310.

[10]Ree S H, Reichl L L E [7]. *Phys Rev B,* 1999, 59: 8163～8169.

[11]Cohen D, Lepore N, Heller E J. *Phys A,* 2004, 37: 2139～2161.

[12] Wang P J and Wu G Z 2005 Acta Phys.Sin.542545 (in Chinese)

[王培杰 吴国祯 2005 物理学报 542545]

[13]Lu J and Du Meng Li 2004 Acta Phys. Sin. 532450(in Chinese)

[陆 军 杜孟利 2004 物理学报 532450]

第三章：Sinai 台球能谱和波函数分布特征

3. 1. 研究背景

量子台球模型是一种广泛运用与研究微观电子器件输运性质[1]和简单原子结构的理论模型[1]。通过将一个粒子束缚在一个密闭的小尺寸区域内，可以计算求解其中的能谱和散射问题。随着边界不同和尺寸大小的差异，台球内的能谱分布是随之改变的。Sinai 台球就是一个典型的例子，随着内部圆形区域和外面方型边界的比例改变，可以实现系统由可积到混沌的连续变化[2]。伴随着半导体工艺的进步，人们已经制备出半导体 Sinai 台球，通过加外磁场和电压来控制台球内电子的运动，可以观测到电导具有分形结构[3]。

利用 BIM 方法计算量子台球系统的本征行为是一种有效的方法，而且可操作性强，编程简单。目前，理论上研究谐振腔和波导管广泛采用的平面波展开方法(Plane-wave Decomposition Method,简称 PWDM)[5][6]就是 BIM 的变形方法[4]；研究开放台球系统的许多工作中，亦可用 BIM 方法[7]。在本文中，笔者通过改进 BIM 方法的寻解判据，可以在计算中快捷的找出 Sinai 台球模型中的本征能级，勾画出能谱曲线和粒子在台球内的波函数分布。为研究复杂边界的台球模型提供了一种可行的数值路径。

3.2. Sinai 台球模型

台球模型可以看作是一种有固定边界的二维无限高势垒[8] 。一个粒子被束缚在某个有固定形状的“盒子”中，“盒子”外视为无穷高势；粒子本身可以在盒子

内做自由运动，内部势函数就是0。台球模型的哈密顿算符为：

$$\hat{H} = \hat{P}^2/(2m) + V(\hat{x}) \tag{1}$$

对应 Sinai 台球（图 1a），势函数为

$$V(\vec{x}) = \begin{cases} 0, \vec{x}\text{在台球}\Pi\text{区域} \\ \infty, \vec{x}\text{在台球I区域} \end{cases} \tag{2}$$

定态薛定谔方程为：

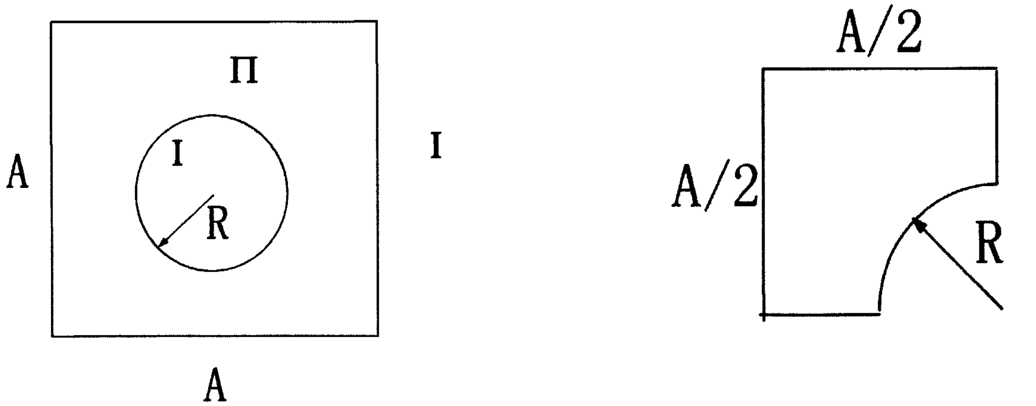
$$\hat{H}\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})\text{。} \tag{3}$$

在台球场Π区内，式(2)可以表示为 Helmholtz 方程[5]：

$$\nabla^2\psi(\vec{x}) + k^2\psi(\vec{x}) = 0 \tag{4}$$

这里$k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$，对于量子台球系统方程式(3)满足 Dirichlet 边界条件：$\psi(\vec{x})\big|_s = 0$。

其中，s 代表在边界上。



(a) 标准的 Sinai 台球模型　　(b)1/4Sinai 台球模型

图 1　Sinai 台球模型

一般认为，由于对称性，Sinai 台球和 1/4Sinai 台球有着几乎相同的物理性质，故只

须研究 1/4Sinai 台球即可得到对整个台球的物理特征的描述。虽然如此，在计算中还是能找到例外。在本章的第 3-4 分，我们将详细介绍

3.3 用 BIM 方法处理 Sinai 台球系统的边界

在 BIM 方法中，波函数可表示为：

$$\psi(\vec{x}) = \oint G(k;\vec{x},\vec{x}_s)\Phi(\vec{x}_s)ds \text{ [4]} \tag{5}$$

上式中 $G(k;\vec{x},\vec{x}^{'}) = -\frac{1}{4}Y_0(k\left|\vec{x}-\vec{x}^{'}\right|)$，这里的下标 s 表示沿边界积分，$\psi(\vec{x})$ 要求满足 Dirichlet 边界条件 $\psi(\vec{x}_s) \equiv 0$。利用数值方法进行计算时，可以将式（5）的积分表示成求和式：

$$\psi(\vec{x}) = \Delta S\sum_s G(k;\vec{x},\vec{x}_s)\Phi(\vec{x}_s),$$

这里 $s = 1,2,3\cdots\cdots N$，表示将边界均匀离散为 N 个离散点，ΔS 为离散后任意两边界点之间的边长。 ΔS 越小，数值误差就越小，但同时要求的计算量也与 N^2 成正比增长，若 N 过小，数值误差就越大，实际计算中会出现大量丢解的情况，在实际计算中，我们一般取 $\Delta S \approx \lambda/3$，这样可以基本保证解的完整性。边界离散后，Dirichlet 边界条件可以表示为：

$$\sum_{s^{'}} G(k;\vec{x}_s,\vec{x}_{s^{'}})\Phi(\vec{x}_{s^{'}}) \equiv 0。$$

如果将上式左边的波函数沿着边界积分，则 $\sum_s\sum_{s^{'}} G(k;\vec{x}_s,\vec{x}_{s^{'}})\Phi(\vec{x}_{s^{'}}) \equiv 0$，这就是分离变量后的 BIM 方程。在计算中，为了精确高效地判定本征解，我们引入了新的判据——“边界残量”，边界残量定义为：

$$T(k)=\frac{1}{A}\Delta S\sum_{s}(\psi_s)^2=\frac{1}{A}\Delta S\sum_{s}\sum_{s'}(G(\vec{x}_s,\vec{x}_{s'})\Phi(\vec{x}_{s'}))^2。$$

其中 A 为 $\psi(\vec{x})$ 的归一化常数。显然，当 $T(k)=0$ 时，$\psi(\vec{x})$ 即为系统的本征态函数，而 $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ 即为系统本征能量。在数值上，我们扫描给定区域的 k，对 $A(k)$ 做 SVD 分解,最后作（$T(k),k$）函数图，在图谱中所有 $T(k)$ 出现极小的地方近似为系统本征态的位置，这样就可以最终给出给定区域内的所有本征能谱 。

3.4 数值结果的讨论和分析

为了便于编程计算，本文中计算的 Sinai 台球(图 1)边长 $A=\pi/2$,中间圆型的半径 $R=0.5$（无标度）。随着在 k 空间扫描得到台球的残余度分布变化曲线（图 2)。

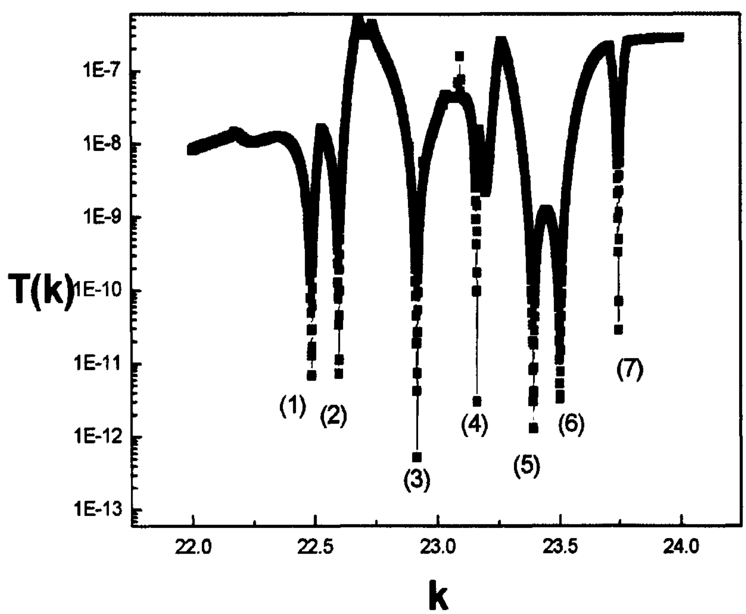


图 2.在 k 空间 $k\in[22.0,24.0]$ 时扫描到的边界残量 T(k)随着 k 的变化曲线

在图 2 中，共找到了 7 个边界残量的最小峰值，它们就是寻找到的 Sinai 台球系统

在的能级在 $k \in [22.0, 24.0]$ 区域找到的能级。

表 1.图 2 中对应位置的能级的数值解

位置	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)
能级(k)	22.485	22.598	22.912	23.162	23.392	23.509	23.750

用类似的方法，可以其他区域的能级数值解，图 3 中给出部分较低能级的能级分布（N 是能级序数）。

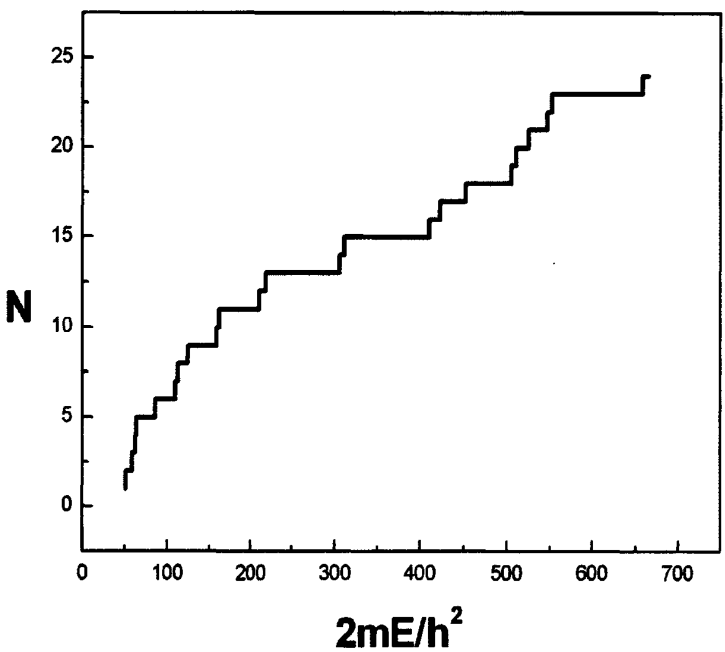


图 3.通过最小边界残量搜索到的部分较低的能级

3.5Sinai 台球在不同能级下粒子在空间的分布几率

通过 BIM 方程，我们可以计算出在给定能态下台球内部各个点的几率波分布，

图 4(a)和图 4(b)就是分别 $k=7.90$ 和 $k=10.64$ 时粒子在 Sinai 台球中的波函数分布。

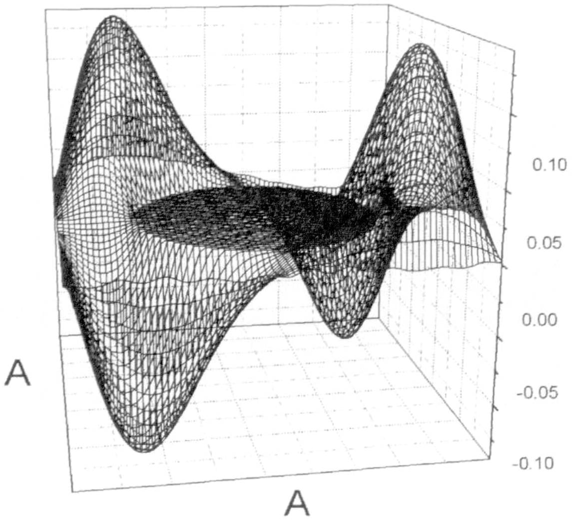


图 4（a）k=7.90 时 Sinai 台球能级波函数空间分布

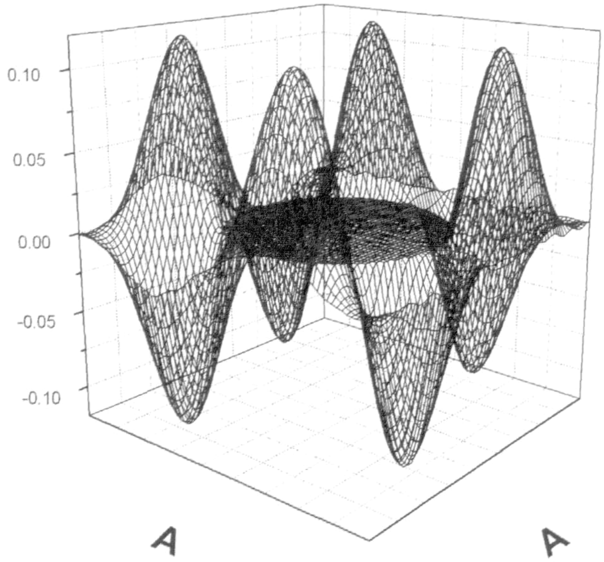


图 4 (b)k=10.64 时 Sinai 台球能级波函数空间分布

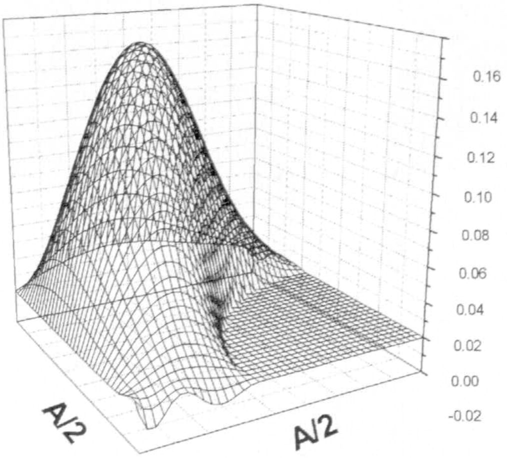


图 5(a)k=7.90 时 1/4Sinai 台球能级波函数空间分布

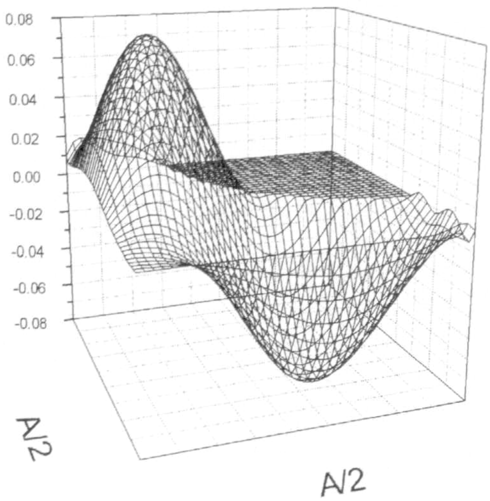
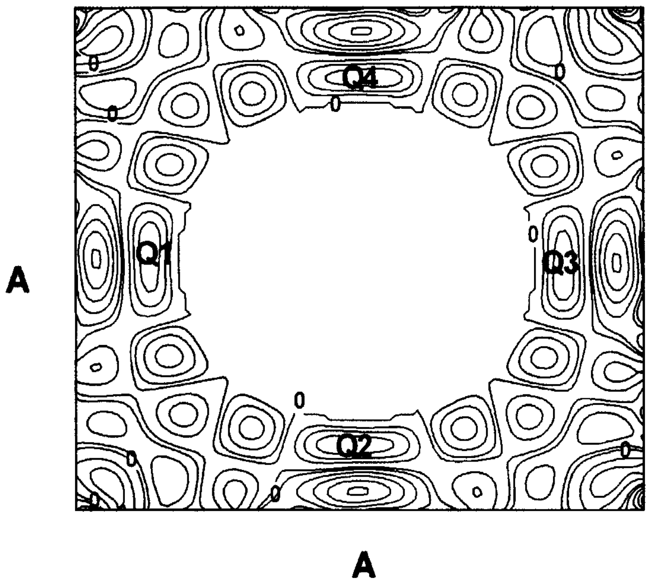


图 5(b)k=10.64 时 1/4Sinai 台球能级波函数空间分布

由图 4 和图 5 可以发现，由于系统的对称性，Sinai 台球内本征态波函数的分布存在着相应的对称性，同时我们还可以发现，在这两个能级下，1/4 Sinai 台球系统的本征波函数与完整 Sinai 台球系统在 1/4 区域的分布有着非常一致的相似性，一定程度上应证了 1/4Sinai 台球和 Sinai 台球具有几乎相同的物理特性[2]64 种相似性从

纯粹的数学意义上是可以完全理解的。同时注意到，这两个能级下分布的波函数是极为规则的。

但是，对于另外一些 Sinai 台球系统的本征态波函数，它们的空间分布却存在着更为复杂的结构(图 6，7)。



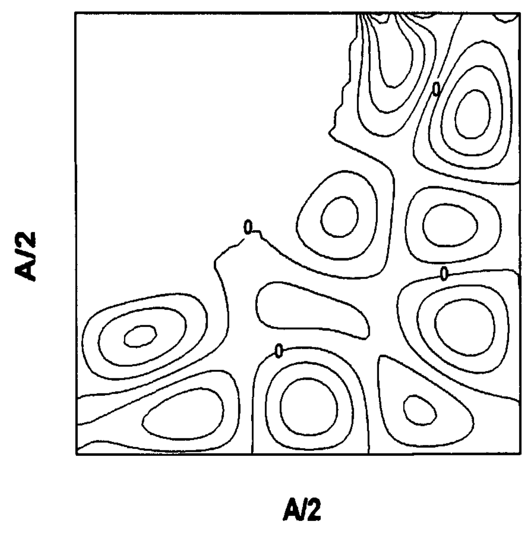
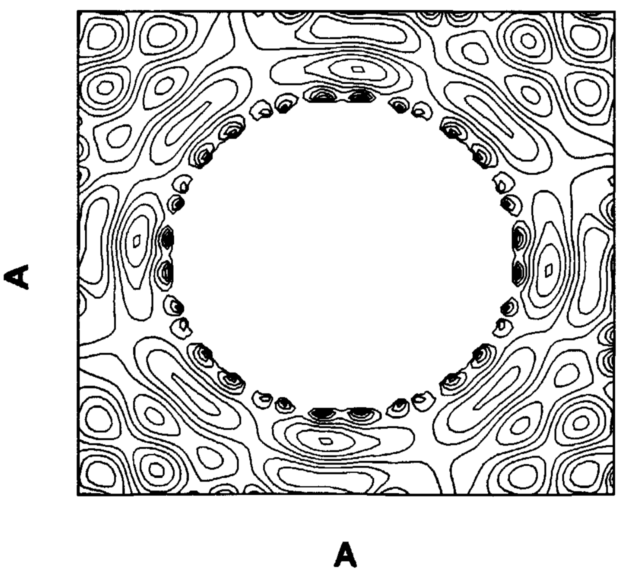


图 6. Sinai 台球(上)和 1/4Sinai 台球（下）在 $k=22.912$ 波函数在 Sinai 台球内分布的等高图。

上图中，标上 0 的是分布几率为 0 的波节线。可以看到，虽然还保留着由系统对称性引入的对称分布的特点，但该分布却已经无法在 1/4 Sinai 台球系统中找到对应，这些能级已经不再是 1/4 Sinai 台球系统的本征能级，这从波函数在矩形中线Q_1,Q_2,Q_3,Q_4上的分布可以看出来，在Q_1,Q_2,Q_3,Q_4上，Sinai 台球系统的波函数出现明显的波峰，它们横跨在两个1/4 Sinai 台球的区域，其1/4 区域的波函数显然不是 1/4 Sinai 台球系统的本征波函数。这说明，两种 Sinai 台球具有相同的经典动力学行为，但量子动力学行为却存在明显的不同。在利用 BIM 方法数值计算系统的本征行为时，边界条件的异同决定了两者会存在相对应的波函数分布，但显然 1/4Sinai 台球的本征谱只是完整 Sinai 台球系统的一个子集。类似的情况，在$k=25.66$时也会找到。如图 7，很明显，这个 Sinai 台球本征波函数和 1/4Sinai 台球相应能量的波函数不存在对应。而且 Sinai 台球内的波函数要比 1/4sinai 台球内的波函数分布复杂得多。



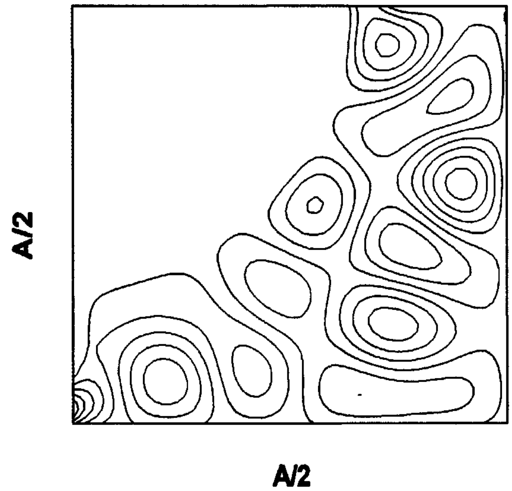


图 7.Sinai 台球（上）和 1/4Sinai 台球（下）在$k=25.66$时波函数分布的等高图

3.6 结论

基于 BIM 方法，通过引入新的边界残量的定义，我们可以快速准确地在 k 空间寻找台球系统的本征能级，并求解相应能级的本征态波函数。我们计算和比较了 Sinai 台球系统能级较低的波函数在空间中的分布，对于一类本征态波函数，如图 4 所示，在每个 1/4 台球区域都分别容纳了整数个波峰，且波节线处于矩形中线上，由此可以说明，这类本征态波函数的每 1/4 个区域上的分布函数都可以理解为一个 1/4 Sinai 台球的本征态波函数；而比较图 6、图 7，我们发现，对于另外一些本征能级，由 BIM 方法构造出的 1/4 Sinai 台球系统在该能量下的波函数不能满足 Dirichlet 边界条件，与完整 Sinai 台球本征态波函数的 1/4 区域明显不同，这说明，

这个能量值并非 1/4 Sinai 台球系统的本征能级。理论上，可以认为通过在 Sinai 台球沿中线对称的放置四条边界，从而将 Sinai 台球转化为 1/4Sinai 台球，但这种操作破坏了 Sinai 台球系统的空间对称性，从而破坏了一些的本征波函数形成的条件。本文计算结果说明，Sinai 台球在高能态下的能谱结构以及本征态波函数要比 1/4 Sinai 台球系统复杂的多，这说明，利用 1/4 Sinai 台球系统的研究结果来推测 Sinai 台球系统的量子行为不是一个好的方法，这里遗漏了许多 Sinai 台球系统所独有的量子特性。

3.7 参考文献

[1]傅怀梁，戴 俊，陈贺 接有导管的开口运动场台球系统 扬州大学学报(自然科学版)2005 Vol.8 No.1 23～27

[2]郭文豪，徐学友，赵霞 二维量子台球与经典的对应 山东师范大学学报(自然

科学版） 2006 vol.21 NO.3 64～66

[3] Taylor R P, Newbury R, Sachrajda A S An investigation of Weierstrass self-similarity in a semiconductor Physical Review Letters,1997 78(10):1955～1962

[4] COHEN D, LEPORE N, HELLER E J. Consolidating boundary methods for finding the eigenstates of billiards [J]. J Phys A, 2004, 37: 2139～2161.

[5]Ree S H, Reichl LE.Abaronov-bohm effect and resonances in the circular quantum billiard with two leads[J]. Phys Rev B, 1999, 59: 8163-8169

[6] Dietz B, Eckmannn J, Pillet C Inside-outside duality for planar billiards: A numerical study *Phys Rev E*,1995,Vol.51 4222～4231

[7] Fuchss K, Ree S H, Reichl L E. Scattering properties of a cut—circle billiard waveguide with two conical leads[J]. *Phys Rev E*, 2001, 63: 016214～016234.

[8] R W Robinett Quantum mechanics of the two-dimensional circular billiard plus baffle system and half-integral angular momentum Eur. J. Phys. 2003, 24 :231-243

第四章：数值模拟量子围栏内的表面态电子分布

4.1 研究背景

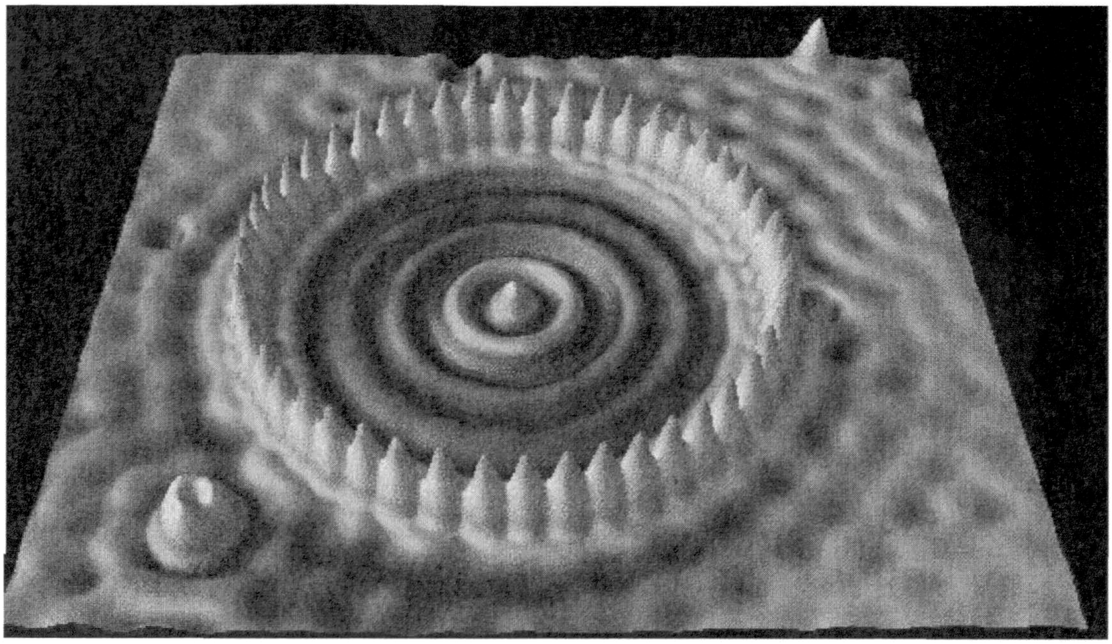


图1 所示的量子围栏[1,2] 是美国加州圣荷塞阿玛丹IBM研究中心的Crommie 等人在液氦温度下,将铁原子蒸发到清洁的Cu(III) 表面,然后用扫描隧道显微镜操纵这些铁原子使它们逐个地定位在铜表面上,从而构造出这些形状各异的闭合图样. 由于这些闭合图样将金属表面的电子像牲畜一样圈围起来,故称这些由原子排列而成的闭合图样为“量子围栏”. 对于处在围栏内金属表面费米态电子而言,这个由原子筑成的围栏便成了一个横向的势垒[3] ,它们被束缚在其内. 由于电子具有波动性,因此,在量子围栏中可明显观察到二维电子概率驻波. 这是微观粒子具有波动性的有力实验证明。

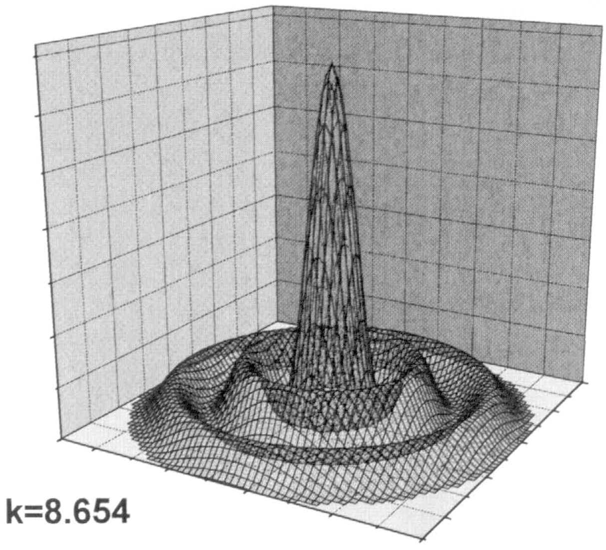
由于原子筑成的围栏便成了一个横向的势垒,电子被束缚在其内，根据微观粒子具有波动性，那么整个系统就是和量子台球系统一样，成为求解一组满足

Dirichlet 边界条件的特殊波函数的问题。而波函数的模方，就表示电子在此处的分布密度。类似文章第二部分，笔者用边界积分方法求解了圆形围栏，台球行围栏和椭圆型围栏的电子表面态分布。

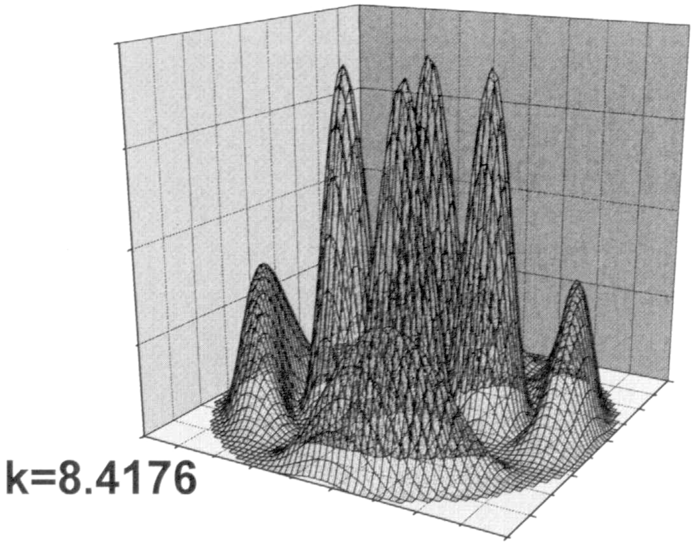
4.2 数值模拟结果：

4.2.1 用 BIM 方法模拟得到的圆形围栏内电子表面态分布

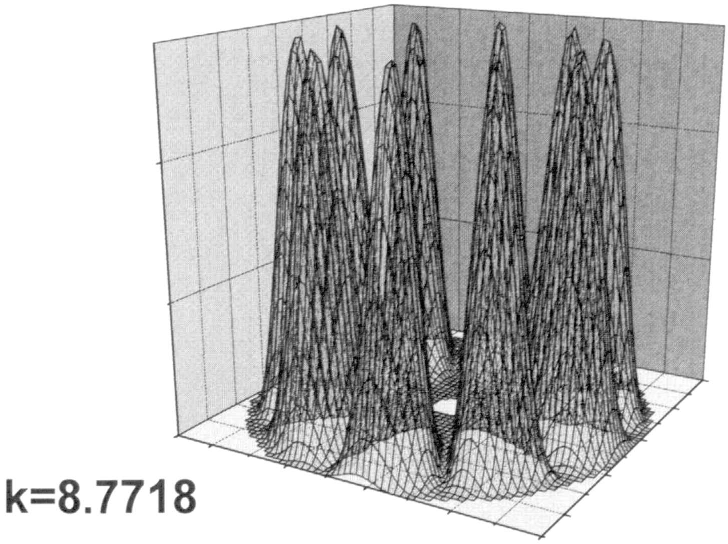
由于系统的数值处理过程和第二章处理圆形闭合台球系统类似，所以数值求解本征值的过程就不在重复，我们挑选出其中能级较低的几个电子态波函数，如下：



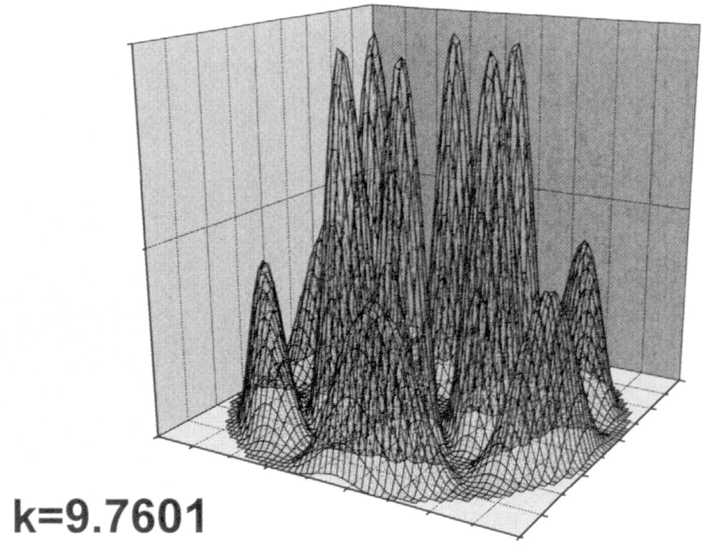
圆型围栏对应于波矢 k=8.654 时的电子表面态分布



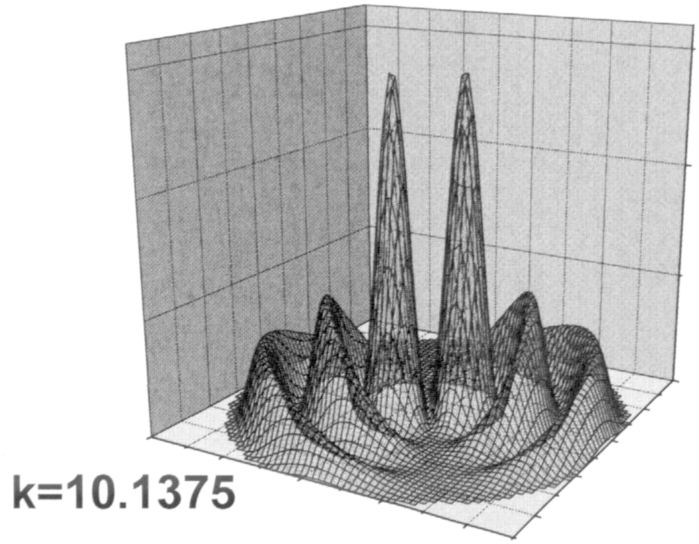
圆型围栏对应于波矢 k=8.4176 时的电子表面态分布



圆型围栏对应于波矢 *k*=8.7718 时的电子表面态分布

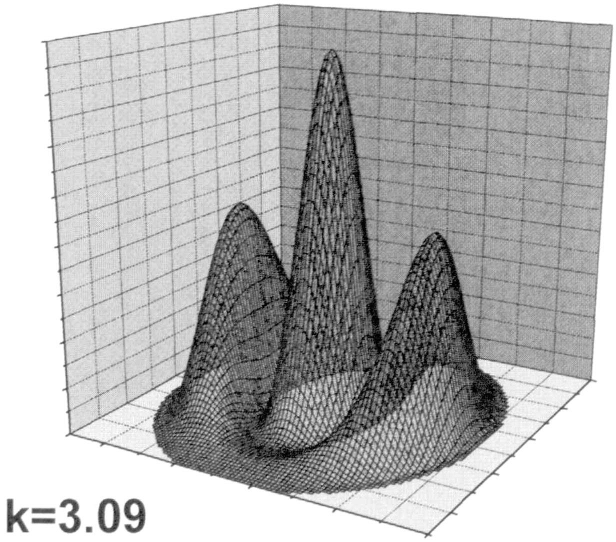


圆型围栏对应于波矢 ***k***=9.7916 时的电子表面态分布

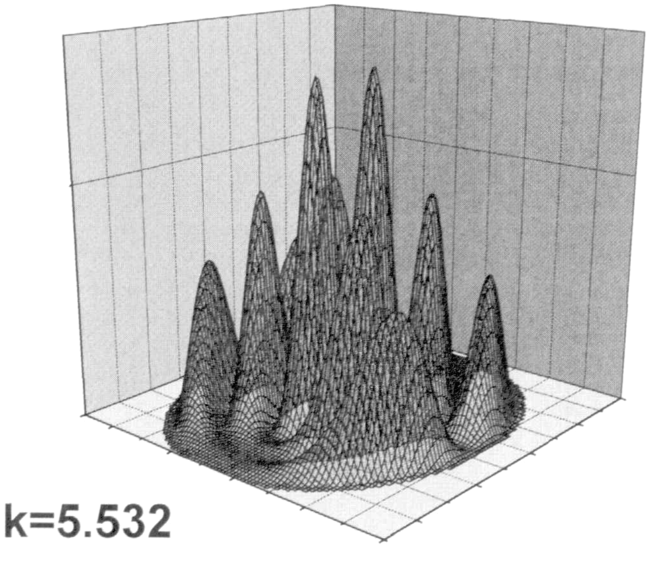


圆型围栏对应于波矢 ***k***=10.1375 时的电子表面态分布

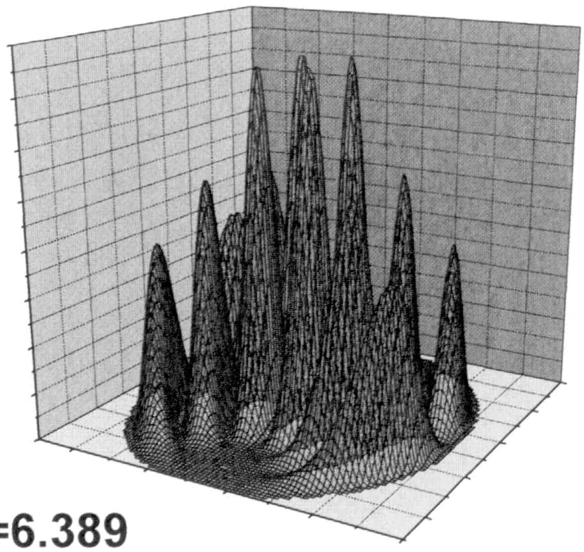
4.2.2 用 BIM 方法模拟得到的椭圆形围栏内电子表面态分布



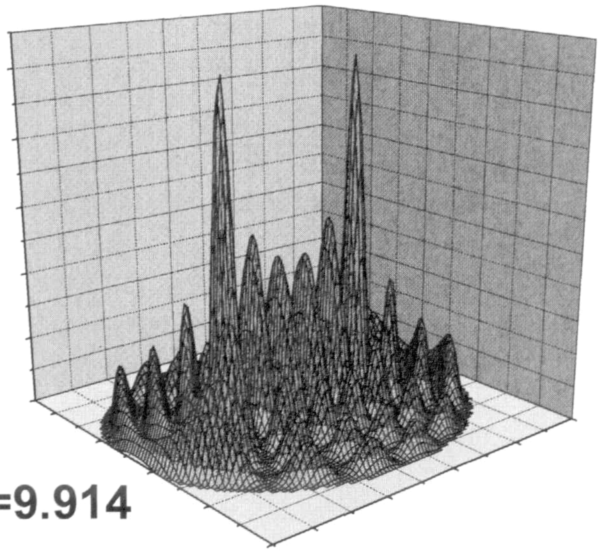
椭圆型围栏对应于波矢 ***k***=3.09 时的电子表面态分布



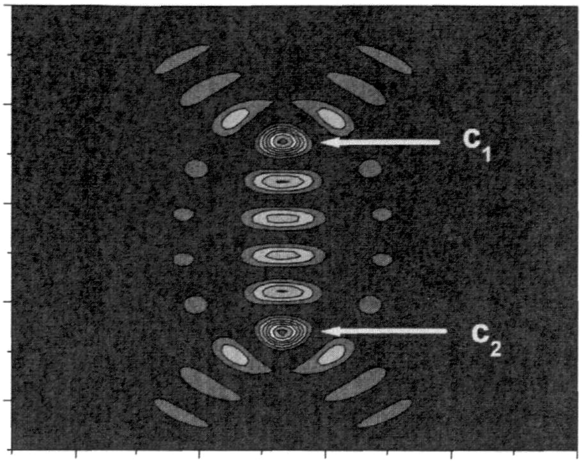
椭圆型围栏对应于波矢 ***k***=5.532 时的电子表面态分布



椭圆型围栏对应于波矢 ***k***=6.389 时的电子表面态分布



椭圆型围栏对应于波矢 k=9.91 时的电子表面态分布



对应与椭圆型围栏对应于波矢 k=9.91 时的电子表面态分布等图中，我们可以注意到，除了一般的电子波函数分布具有对称性以外，在焦点两焦点 C1 和 C2 处电子波函数的分布密度比四周其他位置要高了很多，这意味着如果在其中一个焦点引入某个特殊的电子信号（如自旋信号），如果波函数的分布不改变或近似不变，那么在另个焦点处就应该能找到该信号。

4.3 结论：

借助边界积分数值方法[5]，用计算机解出被束缚在围栏中金属表面态电子相应于不同本征值的波函数及概率密度分布情况，与实验结果相符. 用该方法可以很方便地求得处在任意形状势阱中的微观粒子波函数及概率密度分布情况，为定量研究电子被微观散射物散射产生的干涉现象提供一种数值手段。

4.4参考文献

[1]M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler ***Science*** 262, 218-220 (1993).

[2]M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler. *Nature 363, 524-527 (1993).*

[3]量子围栏中金属表面态电子概率密度分布 周佩瑶

天津大学学报Vol. 37 No.10 Oct. 2004

[4]H.C. Manoharan, C.P. Lutz and D.M. Eigler. Nature 403 (2000), p. 512.

[5]Cohen D, Lepore N, Heller E J. ***Phys A***, 2004, 37: 2139～2161

第五章：模拟椭圆型围栏内焦点处存在势垒的数值工作

5.1.研究背景

与一般量子围栏[1，2]不同，若将 36 个钴原子摆成椭圆形，将一个磁性钴原子放置于其中一个焦点，即可在实际上并无任何原子的另一焦点，却得到具自旋同向的电子讯号。若将此磁性钴原子放置于其他地方，则完全沒有此种任何变化。这代表原子上电子密度经由周围表面电子波，传讯讯息至另一焦点，形成建设性干涉，而在其他地方形成破坏性干涉。這是波的独特性质。

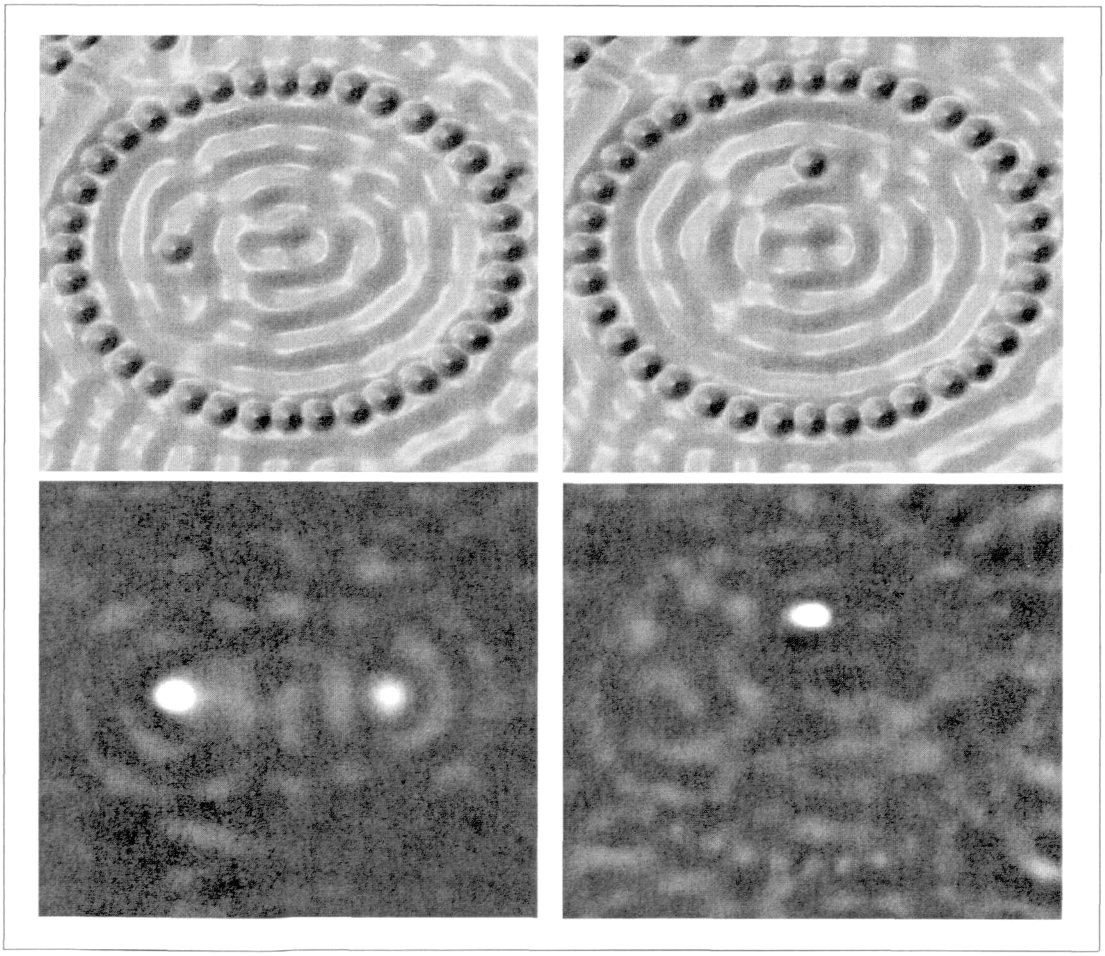


图 1

IBM 公司认为此设计结果将代表一原子的信息传递到 20 纳米以外的另一并无原子之处，此性质可作为未来纳米 IC 元件中传导线[3]。此两个结果代表了电子集体效应与波干涉效应。

图 1 上面的两图代表钴原子围城的椭圆量子围栏，其中，左上图在围栏长轴焦点上放置了一个磁性钴原子，右上图则代表在其他地方放置的磁性钴原子，结果发现对应于前者在焦点出放置原子的情况，出现了在对称焦点上也测出了自旋同向的电子讯号（左下），在其他地方则没有此类情况。

5.2.数值模拟工作

在文章第四章，我们已经成功的模拟出椭圆型量子围栏的电子表面态波函数分布。在此基础上，如果把内层放在焦点的那个钴原子也看成是一个很高的“势垒球”，就可以用边界积分方法求得这个闭合系统内部的驻波态。所以，笔者将系统近似成如下一个二维模型：

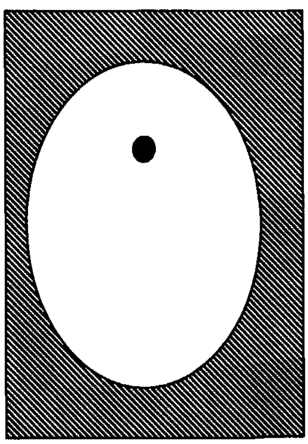


图 2 中，打上斜线的外围代表了沿着椭圆边界外侧是一个无穷高的势垒，在台球内部小黑点代表放在焦点的钴原子也用一个无穷高的势垒近似。

近似之后，通过边界离散，求得了如下的电子驻波态分布

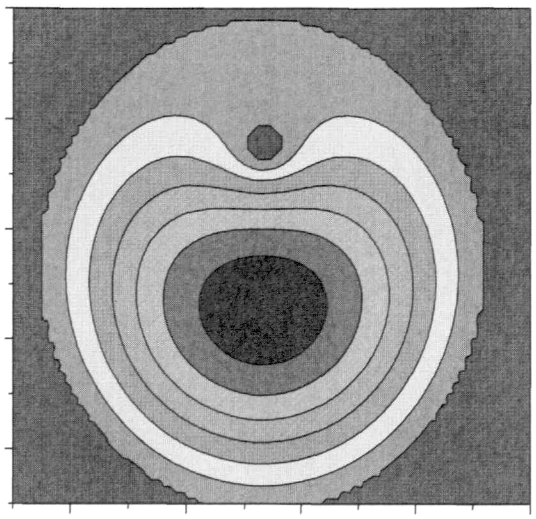


图 3（a）k=1.44 时，电子波函数在围栏内部的波函数分布等高图。

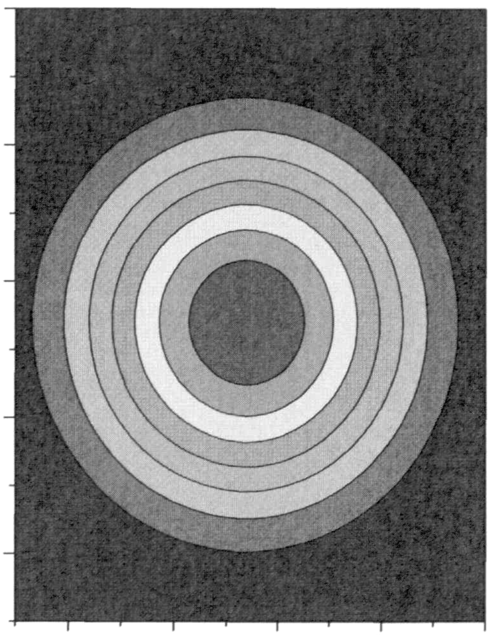
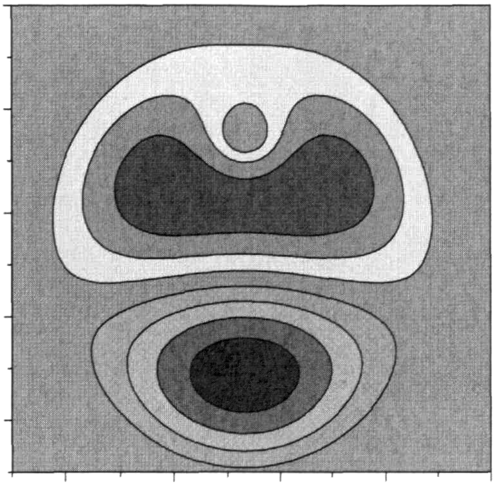


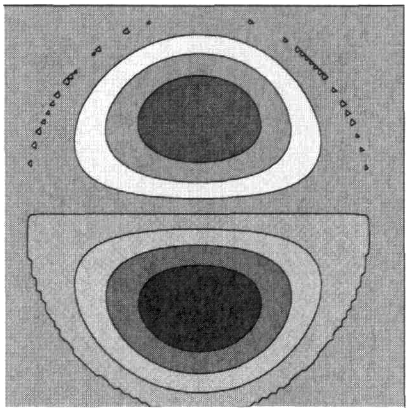
图 3（b）k=1.29 时，电子波函数在普通椭圆围栏内部的波函数分布等高图，由于

在焦点处不存在势垒，所以波函数对称性很好。



k=2.293

图 4（a）k=2.293 时，电子波函数在围栏内部的波函数分布等高图。



k=1.993

图 4（b）在同尺寸的 k=1.993 的椭圆台球中，找到了对应前图的电子态分布，由于中焦点没有势垒，电子的波函数对称性较好，同时，注意到焦点处的势垒可以影响到能态的分布。

随着能态的升高，系统内部的波函数也变的复杂化，图 5 和图 6 的波函数分别表示了 k=8.62 和 k=9.606 的体统表面态电子波函数分布。可见，由于焦点处势垒的加入，破坏了系统的空间对称性，波函数分布也反映出来这种对称性破坏。

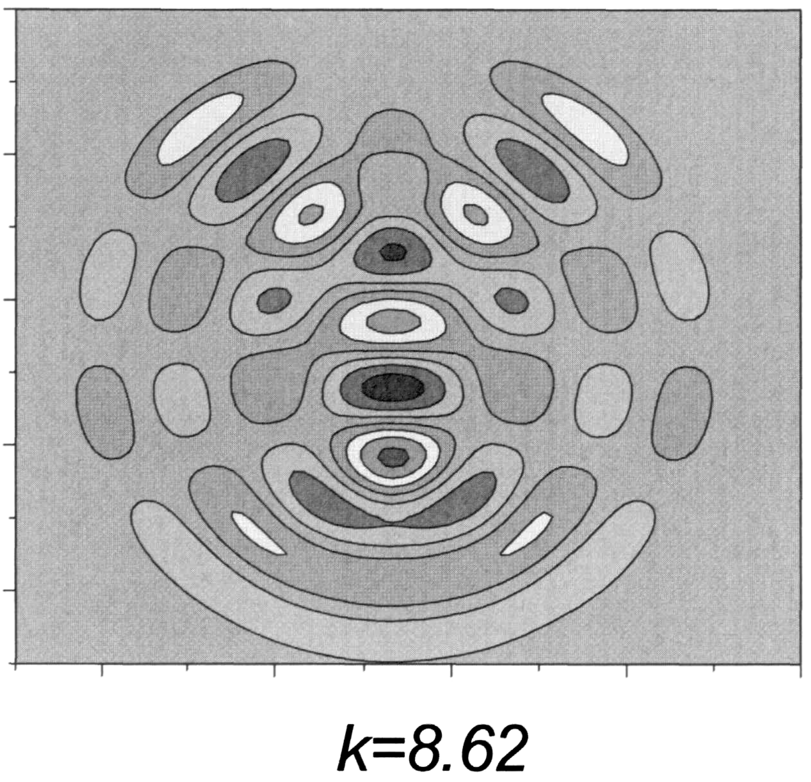


图 5　k=8.62 表面态电子波函数

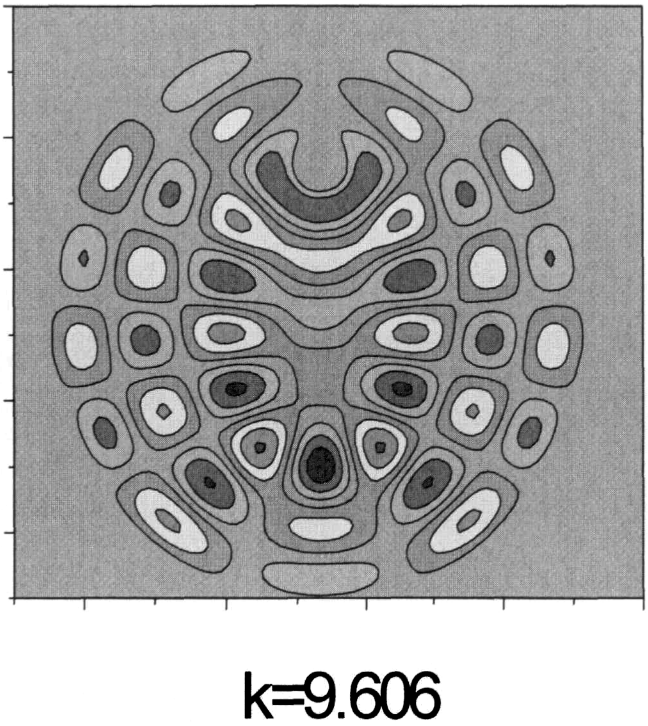


图 6 k=9.606 表面态电子波函数

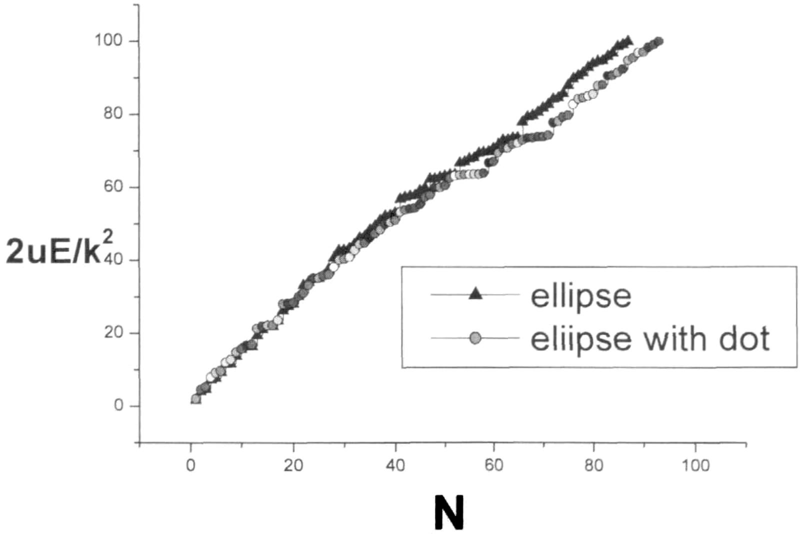


图 7 比较了在椭圆围栏内焦点上存放一势垒对该系统能级分布的影响

三角代表椭圆的能级分布，圆点则是椭圆焦点存放一小球型势垒的能级分布。计算结果说明，当焦点处的圆形势垒区域较小时，系统为近可积系统，其展平后的能级近邻间隔分布接近于泊松分布。

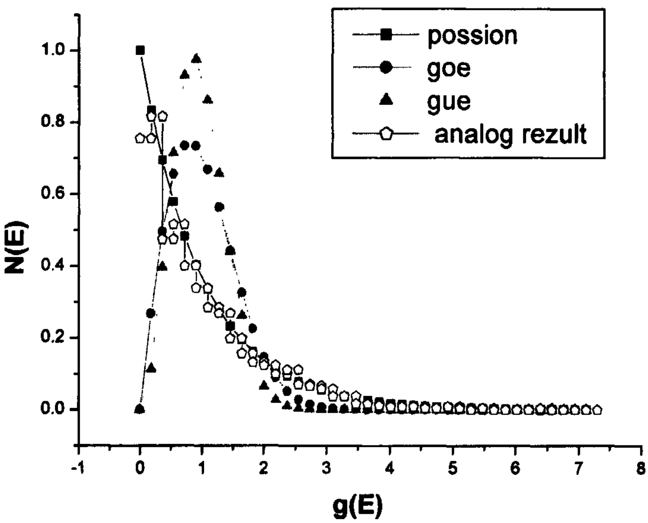


图 8.将图 7 中焦点处存在势垒的椭圆系统做能谱展平[4]，发现展平后的谱线（空心点曲线）和 Possion 曲线（黑方点曲线）比较接近，是个近可积的物理系统。

5.3 部分结论：

笔者用 BIM 方法计算和比较了椭圆型围栏内在焦点处存在势垒的量子台球模型内部的电子波函数分布以及其能量本征谱的分布与椭圆形量子围栏的差异。结果说明，两者无论是能态分布和电子的空间分布都存在着明显的差异，这显然是由于在焦点处引入了的圆形势垒所造成的。对能谱的分析说明，在该系统的展平

后能谱的能级近邻间隔分布近似为泊松分布，说明，加入小区域的圆形势垒后的椭圆形量子围栏为近可积系统，我们猜测小区域的势垒的加入，可以看作是微扰，而它对系统可积性的破坏是局部的，系统整体的行为变化不大，加大势垒的区域以及改变势垒形状，会加强对系统特性的影响，最终会导致系统整体性质的完全破坏，这有待于后期工作的验证。

另外，从计算结果来看，在左焦点的对称位置，表面电子态的分布并没有发生有明显的关联或类似的分布和改变，这从对称性的角度来说，是比较容易理解的，由于同样原因，普通的椭圆型量子围栏在两个焦点处存在对称分布的电子表面态情况，且部分解在焦点处的分布出现密集分布，这与试验所观察到的现象较为相似，但这无法解释在椭圆量子围栏内部观察到的“量子鬼影”[5, 6]现象。我们猜测，这与所加入的圆形势函数有关，这与实际试验系统差异较大，如果引入有限高势垒（阱），更接近于试验系统，有望重现“量子鬼影”现象，这部分工作有待进一步验证。

5.4 参考文献

[1]M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler ***Science*** 262, 218-220 (1993).

[2]M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler. *Nature 363, 524-527 (1993).*

[3]H.C. Manoharan, C.P. Lutz and D.M. Eigler. Nature 403 (2000), p. 512.

[4]量子混沌[M]. 顾雁编, 1996：5~6

[5] K. Hallberg, A.A. Correa, C. Balseiro, Phys. Rev. Lett. 88 (2002) 066802.

[6] A. Correa, K. Hallberg, C. Balseiro, Europhys. Lett. 58 (2002) 6.

论文结果和展望

本文中，笔者首先讨论分析了边界积分方法在处理台球系统和量子围栏模型的可行性。同时，笔者也提出了一些数值改进该方法的技巧，用“边界残量”这一新的判据作为确定本征能级的标尺和手段。文章第二部分中，笔者的数值改进提高了数值求解本征能级的精确度和效率。并且，引入了波函数之间的关联；以关联度的大小作为判断能级是否简并。结果改进工作发现数值结果与理论符合的很好，为用数值方法分析其他复杂的量子台球系统提供了一种可行的路径。

在改进了数值计算方法后，笔者分别求解了 Sinai 台球模型系统和 1/4Sinai 台球系统内电子的本征能级和本征态波函数。笔者的计算结果显示：由于边界不同，Sinai 台球在高能态下的能谱结构以及本征态波函数要比 1/4 Sinai 台球系统复杂的多，这说明，利用 1/4 Sinai 台球系统的研究结果来推测 Sinai 台球系统的量子行为不是一个好的方法，这里遗漏了许多 Sinai 台球系统所独有的量子特性。

在文章的最后，笔者用数值方法模拟了圆型围栏，和椭圆行围栏内的电子波函数分布，得到了很好的结果。但在试图用类似方法模拟椭圆台球内部的“量子鬼影”时，没有看到实验中显现的对称映像。笔者认为，这可能跟用势垒壁近似原子太过简所至。但这也至少说明了，不能简单的认为出现对称影像的原因是由于在对称焦点上电子波函数密集所至，对模型进行进一步的改进提出新的思路。

附录 1：BIM 数值操作的边界离散化问题

在文章第二部分，提到解式(2)定态薛定谔方程的解，我们可以采用格林函数方法求解[1]。对于自由粒子，定义自由粒子的格林函数 $G(x,x^{'})$ 为：

$$(-k^2-\nabla^2)G(k;x,x^{'})=\delta(x-x^{'})$$

自由粒子的格林函数解为：：

$$G(k;\vec{x},\vec{x}^{'})=-\frac{1}{4}Y_0(k\left|\vec{x}-\vec{x}^{'}\right|)+\varphi(\vec{x},\vec{x}^{'})$$

这个解也就是 BIM 方法中离散边界条件后定义的 Fredholm 矩阵：

$$A_{ij}(k)=G(k;\vec{x}_i,\vec{x}_j)$$

的原形。那么，在第二部分已经提到过，$\vec{x}$ 和 $\vec{x}^{'}$ 都是边界上的点，那么，由贝塞尔函数的 0 点发散性质决定了这两点不能取同一个点，否则 SVD 程序将很难将 Fredholm 矩阵对角化，为了克服这个问题，笔者在计算边界离散点时实际上人为的将 $\vec{x}$ 和 $\vec{x}^{'}$ 取在不同的边界上，但两个边界又彼此十分接近。

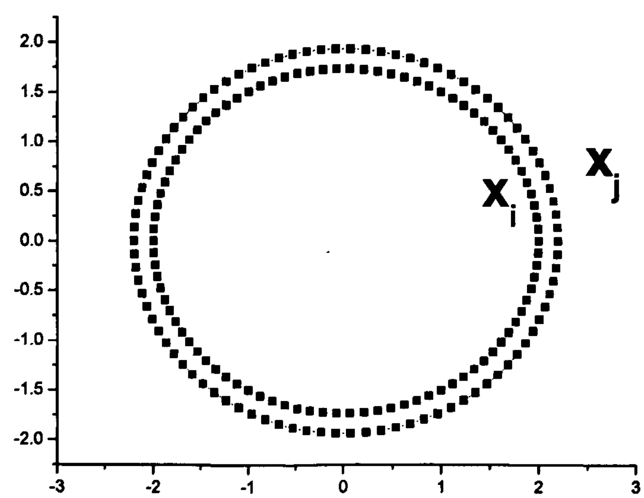
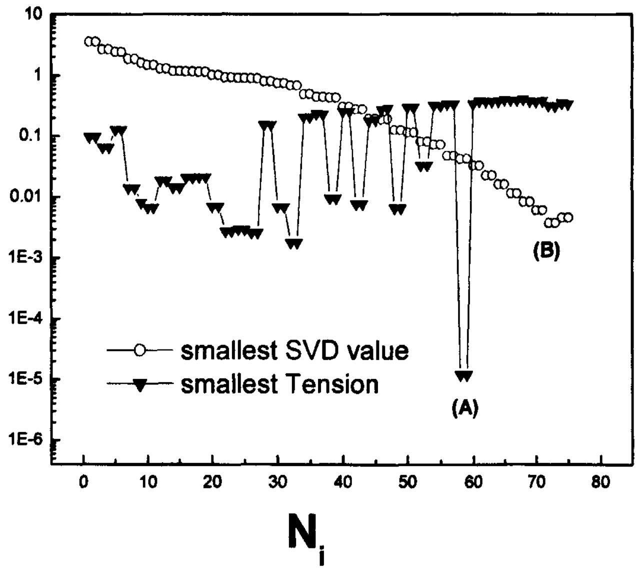


图 1.以椭圆边界为例子，将边界点 $\bar{x}_i$ 放在真实的椭圆边界上后（内圈点），将 $\bar{x}_j$ 放置在一个紧靠着的一个“虚拟的”外边界上。用这两组点来构造 Fredholm 矩阵。

附录 2：用最小奇异值和最小边界参量确定本征能级的异同

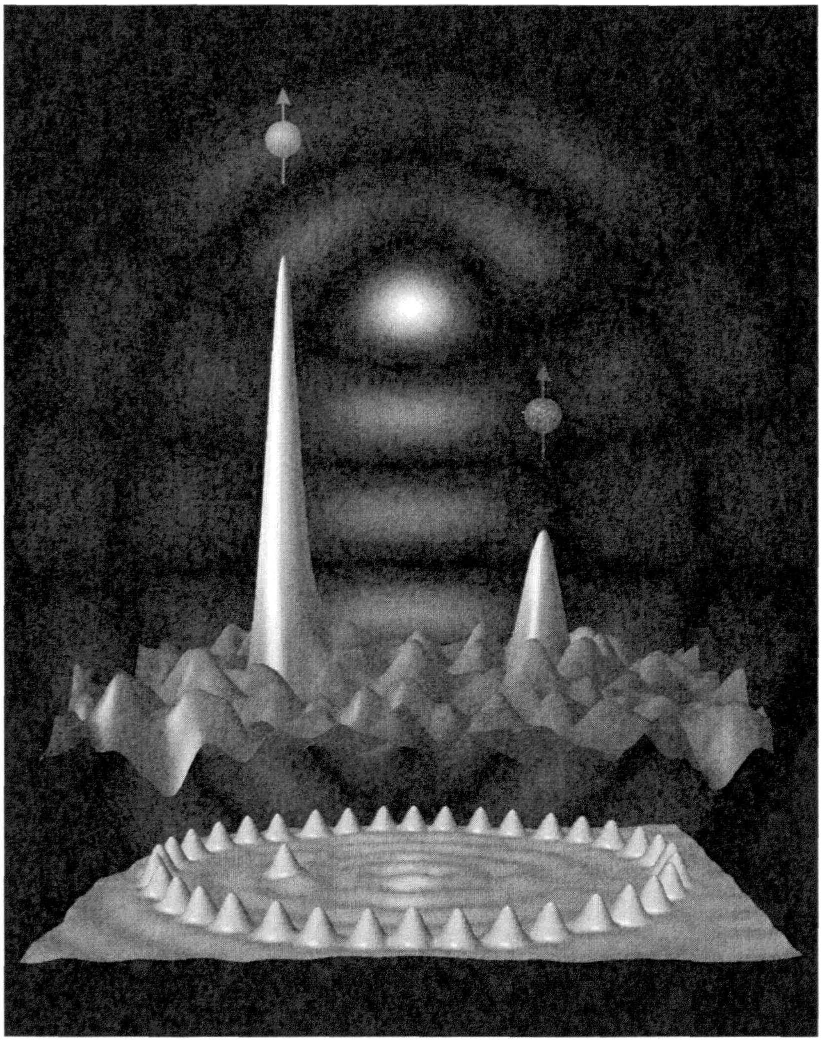
理论上，用最小奇异值和最小边界参量确定的本征能级应该是等效的[1]，实际操作时，笔者却发现两者的寻根结果是有很大的差异的。 不仅仅如文章第二部分所讲的那样，直接用 SVD 寻找本征能级会出现相当多的“伪解”，即使对与同一个波矢 k,以最小奇异值和最小边界参量确定的对应最小值的 $\Phi^j(\bar{x}_s)$ 也是不一样的。



在上图中，对应了圆台球 k=20.35 的能态用最小奇异值和最小边界残量求出的

构造波函数的右矢 $\Phi^j(\bar{x}_s)$ 的序列数是不同的，决定了两者构造出的波函数也是不同的。明显的，用后者构造的波函数最小残余要比后者在边界上构造的波函数最小残余要小的多，更好的满足了 Dirichlet 边界条件：$\psi(\bar{x})\big|_s = 0$。

附录 3：椭圆台球内的量子影子映像



在上图模型中，将 36 个钴原子摆成椭圆形，将一个磁性钴原子放置于其中一个

焦点，即可在实际上并无任何原子的另一焦点，却得到具自旋同向的电子讯号。若将此磁性钴原子放置于其他地方，则完全没有此种任何变化，其形成的影像既是所谓的“量子鬼影”。目前通用的解释是原子上电子密度经由周围表面电子波，传讯息至另一焦点，形成建设性干涉，而在其他地方形成破坏性干涉。這是事物粒子波的独特性质。IBM 公司认为此设计结果将代表一原子的信息传递到 20 纳米以外的另一并无原子之处，此性质可作为未来纳米 IC 元件中传导线。此结果代表了电子集体效应与波干涉效应。

致 谢

非常感谢我的导师陈贺胜老师在这三年多时间给我的悉心指导与谆谆教诲，正是在他的指导之下才使我能够顺利完成学业，更让我积累了很多丰富的科研知识，培养了自己自学的能力，增强了我在科研过程中战胜困难的信心。

非常感谢物理科学与技术学院的其他老师在我学习过程中给我的帮助和教诲，以及学院领导对我这几年来的教育和培养，为我提供和营造了良好的科研学习生活环境！

非常感谢我的师兄师弟们给我的帮助和合作，让我的生活学习更加乐趣！

衷心祝愿各位老师和同学身体健康，合家幸福！谢谢！

攻读硕士期间发表论文

1．数值研究 Sinai 台球能谱和电子波函数分布特征　张正中 陈贺胜

扬州大学学报　Vol. 11, Feb, 2008

2. 孤立的和水溶液中的苯丙氨酸分子结构和振动性质研究

郭云[1)] 张正中[1)] 曾祥华[1] 王志萍[2)] 赵江[1)] 张宣[1)]

扬州大学学报　Vol. 12, May, 2008