

# A periodikus pálya elmélet a klasszikus- és kvantummechanikában

Az MTA Doktora cím megszerzéséhez benyújtott értekezés

Vattay Gábor  
a fizikai tudományok kandidátusa

2002



# Tartalomjegyzék

<b>1. Bevezető</b>	<b>9</b>
1.1. Klasszikus mechanika . . . . .	14
1.1.1. A sűrűségfüggvény időfejlődése . . . . .	14
1.1.2. Az átlagolás . . . . .	15
1.1.3. A klasszikus trace formula . . . . .	18
1.1.4. Szökési ráta a három diszk rendszerben . . . . .	20
1.1.5. Periodikus pályák a három diszk rendszerben . . . . .	22
1.1.6. Kummuláns kifejtés . . . . .	25
1.1.7. Általános rendszerek . . . . .	26
1.2. Kvantummechanika . . . . .	27
1.2.1. A hullámfüggvény időfejlődése . . . . .	28
1.2.2. A Green függvény . . . . .	31
1.2.3. A trace formula és a spektráldetermináns . . . . .	33
1.2.4. Rezonanciák a három diszk rendszerben . . . . .	35
1.3. A trace formula korrekciói . . . . .	38
<b>2. A diffrakció periodikus pálya elmélete</b>	<b>43</b>
2.1. A diffrakció geometriai elmélete . . . . .	43
2.2. A diffraktív trace formula . . . . .	47
2.3. A diffraktív spektráldetermináns . . . . .	48
2.4. Két diszk rezonanciák . . . . .	50
2.4.1. A szemiklasszikus Green függvény kiszámítása . . . . .	50
2.4.2. A diffraktív pályák járuléka . . . . .	53
2.5. A három diszk rendszer . . . . .	54
2.6. Diffrakció egy zárt rendszerben . . . . .	57
2.6.1. A Sinai biliárd a kis diszk határesetben . . . . .	58
2.6.2. Az energiaszintek perturbatív vizsgálata . . . . .	61
2.6.3. A diffrakció hatása az energiaszintek statisztikájára . . . . .	61

2.7. Összefoglalás . . . . .	65
<b>3. Diffraktív pályák mezoszkopikus vezetőkben</b>	<b>67</b>
3.1. Példák pszeudo integrálható rendszerekre . . . . .	68
3.2. A Landauer-Bütiker Formula . . . . .	68
3.3. Szemiklasszikus transzmisszió és reflexió . . . . .	71
3.4. A diffrakció okozta effektusok . . . . .	76
3.5. Diffraktív periódusok a teljesítmény spektrumban . . . . .	81
3.6. Összefoglalás . . . . .	83
<b>4. Diffrakció mezoszkopikus normál-szupravezető rendszerekben</b>	<b>87</b>
4.1. PLS a normál rendszerben . . . . .	88
4.2. PLS az NS rendszerben . . . . .	89
4.3. A PLS kiszámítása az NS rendszerben . . . . .	92
4.4. Összefoglalás . . . . .	95
<b>5. A Gutzwiller trace formula kvantum korrekciói</b>	<b>97</b>
5.1. A trace lokális kiszámítása . . . . .	97
5.2. A $\hbar$ sorfejtés mint zaj korrekció . . . . .	99
5.3. Sorfejtés a periodikus pályák környezetében . . . . .	101
5.4. Lokális sajátértékek . . . . .	101
5.5. A korrekciók kiszámítása . . . . .	103
5.6. Az eredmények tesztelése a három diszk rendszeren . . . . .	104
5.7. Összefoglalás . . . . .	107
<b>6. Kaotikus rendszerek zaj korrekciói</b>	<b>109</b>
6.1. Egydimenziós leképezések trace formulája . . . . .	110
6.2. Zajos leképezések evolúciós operátorai . . . . .	113
6.3. Az evolúciós operátor mátrix reprezentációja . . . . .	115
6.3.1. Az evolúciós operátor lokális mátrix reprezentációja . . . . .	116
6.3.2. A sajátértékek perturbatív korrekciói . . . . .	119
6.3.3. Numerikus eredmények . . . . .	121
6.4. Az operátor nyomának korrekciói . . . . .	124
6.4.1. A trace kiszámítása a reziduumenttel . . . . .	125
6.4.2. Magasabb rendű zajkorrekciók . . . . .	126
6.5. Általánosítás tetszőleges rendekre . . . . .	130
6.5.1. Analógia a kvantummechanikával . . . . .	130

6.5.2.	Az evolúciós operátor Fourier reprezentációja . . . . .	132
6.5.3.	A trace formula korrekcióinak trace formulája . . . . .	134
<b>7.</b>	<b>A kváziklasszikus operátor</b>	<b>139</b>
7.1.	Időfejlődés az érintőtérben . . . . .	143
7.2.	Multiplikatív időfejlesztő operátor . . . . .	145
7.2.1.	A spektráldetermináns . . . . .	147
7.3.	Összefoglalás . . . . .	149
<b>8.</b>	<b>Összefoglalás és tézisek</b>	<b>151</b>
8.1.	Az alkalmazott módszerek . . . . .	153
8.2.	Tézisek és elhelyezkedésük az értekezésben . . . . .	154



# Köszönetnyilvánítás

Köszönetemet szeretném kifejezni Szépfalusy Péternek és Tél Tamásnak, akik pályámon elindítottak, és megismertettek a dinamikai rendszerek és káosz gazdag világával; Predrag Cvitanovićnak és André Vorosnek, akiktől a periodikus pályák elméletét tanultam; Cserti Józsefnek és doktoranduszaimnak Pollner Péternek, Palla Gergelynek, Szálka Gergelynek, Koltai Jánosnak, Kormányos Andornak, Németh Zoltán Ádámnak, akikkel sokat dolgoztunk együtt, Geszti Tamásnak és a tanszék összes munkatársának, akik munkámban mindig segítettek. Végül köszönöm feleségemnek és gyermekeimnek azt a sok időt, amit helyettük ennek a dolgozatnak a megírására fordítottam.





# 1. Fejezet

## Bevezető

Niels Bohr 1913-ban, annak érdekében, hogy megkapja a hidrogén atom kvantált energiaszintjeit, a klasszikus mechanikát ad hoc szabályokkal egészítette ki. Bohr ellentmondásos kvantálási szabályai a kvantummechanika megszületésével váltak érthetővé 12 évvel később. Eközben Bohr szabályait általánosították, és alkalmazták más rendszerekre is. A legismertebb ilyen próbálkozások Sommerfeldtől, Kramerstől és Paulitól származnak. Azonban mindezek az erőfeszítések sikertelenek maradtak komplexebb atomok, mint például a hélium, esetén. Albert Einstein, egy 1917-ben írt cikkében [Einstein 1917] fordítva tette fel a kérdést, és megvizsgálta, hogy melyek azok a rendszerek, amelyekben a Bohr-Sommerfeld kvantálási szabályokat egyáltalán alkalmazni lehet. Arra a következtetésre jutott, hogy a kvantálási szabályok csak olyan rendszerekben alkalmazhatók, melyek fázisterében a klasszikus pályák tóruszokon helyezkednek el. Ma ezeket a rendszereket integrálhatónak nevezzük. A nem-integrálható rendszerek, melyeket ma kaotikusnak neveznénk, nem kvantálhatók ezzel a módszerrel. A legalább három változót tartalmazó generikus differenciál egyenletekhez általában nem találhatók első integrálok, melyek segítségével azokat megoldhatnánk, így bennük a dinamika nem-integrálható ill. kaotikus lesz. A Hélium atom esetén pontosan ez a probléma jelentkezik. Rögzített magot tekintve, a két egymással kölcsönható elektron kaotikus mozgást folytat.

Einstein cikkére az első negyven évben mindössze egy hivatkozás érkezett [Lanczos 1949]. A cikket 1958-ban fedezte fel újra J. B. Keller [Keller 1958] az integrálható rendszerek szemiklasszikus kvantálása kapcsán. Keller és Maslov munkái nyomán ekkor nyerték el végleges alakjukat az integrálható rendsze-

rek tórusz kvantálásának ún. EBK (Einstein-Brillouin-Keller) formulái,

$$\frac{1}{2\pi} \oint p_i dq_i = \hbar(n_i + \mu_i/4), \quad (1.1)$$

ahol  $p_i$  és  $q_i$  egy konjugált impulzus és koordináta pár,  $n_i = 0, 1, 2, \dots$  egész szám,  $\mu_i$  pedig a Maslov index, mely a határfeltételektől függően a 0,1,2,3 vagy 4 értékeket veheti fel.

A szemiklasszikus közelítés formálisan a kvantummechanika  $\hbar \rightarrow 0$  határesetben vett aszimptotikus közelítése. Ebben a közelítésben az elektron de Broglie hullámhossza,  $\lambda \sim \hbar/p$ , rövid, ami lehetővé teszi, hogy az elektron pályákat klasszikusnak tekintsük, és kvantumviselkedésüket csupán a klasszikus pályák közt fellépő hulláminterferencia során vegyük figyelembe. A rövidhullámú közelítés minden hullámegyenlet esetén alkalmazható. A közelítés radar, sonar és geofizikai alkalmazásokban betöltött kulcsszerepe okozta, hogy a negyvenes évek eleje és az ötvenes évek vége között egyáltalán nem jelentek meg e témában publikációk.

A szemiklasszikus közelítés nem-integrálható rendszerekre való kiterjesztését végül Martin Gutzwiller adta meg 1967 és 1969-ben megjelent cikkeiben [Gutzwiller 1967, Gutzwiller 1969], néhány héttel Roger Balian és Claude Bloch hasonló eredményei előtt [Balian, Bloch 1970, Balian, Bloch 1971]. Gutzwiller a kristályos szilícium elektron szerkezetét vizsgálta. A szilícium külső elektronjai a mag Coulomb vonzását érzik, és klasszikusan Kepler féle ellipsziseken mozognának, azonban a rácsszerkezet és közvetetten a kölcsönhatások miatt, az elektron effektív tömege irányonként erősen eltérő. Így az ún. anizotrop Kepler problémához [Gutzwiller 1970, Gutzwiller 1971, Gutzwiller 1973, Gutzwiller 1977] (AKP) jutunk, melyben az elektronok mozgása erősen kaotikus. Gutzwiller az elektron szemiklasszikus állapotsűrűségét a propagátor Feynman [Feynman 1948] féle pálya integrál alakjának stacionárius fázis közelítéséből származtatta le. Az így kapott ún. trace formula az állapotsűrűséget a klasszikus periodikus pályákra vett végtelen összeg alakjában állítja elő,

$$\varrho(E) = \varrho_0(E) + \frac{1}{\pi\hbar} \sum_{p,r} T_p \frac{e^{\frac{i}{\hbar} r S_p(E) + i\pi r \mu_p/4}}{|\det(\mathbf{1} - \mathbf{J}_p^r)|^{1/2}}, \quad (1.2)$$

ahol  $p$  indexeli a rendszer primitív (egyszeri körüljárás utáni) periodikus pályáit,  $r$  indexeli a pályák repetícióit,  $S_p(E) = \oint p dq$  a periodikus pálya

klasszikus hatása,  $\mu_p$  a pálya Maslov indexe,  $\mathbf{J}_p$  a pálya stabilitási vagy monodrómia mátrixa,  $\varrho_0(E)$  pedig a statisztikus fizikából ismert átlagos állapot-sűrűség,

$$\varrho_0(E) = \frac{1}{h^d} \int_{\mathcal{M}} \delta(E - H(q, p)). \quad (1.3)$$

A szemiklasszikus közelítésben érvényes Gutzwiller trace formula a periodikus pálya elmélet egyik kiindulópontja.

A Gutzwiller trace formula keletkezésével párhuzamosan, attól lényegében függetlenül, kialakult a dinamikai rendszerek periodikus pálya elmélete is. Henri Poincaré 1892 és 1907 között megjelent "Les Méthodes Nouvelles de la Mécanique Céleste" kötetében a mechanika egyenleteit vizsgálva belátja, hogy a mozgásegyenletek nem mindig léteznek megmaradó *első integráljai*, és így azok nem oldhatók meg explicit módon. Kimutatta, hogy az ilyen *nem-integrálható* rendszerekben a pályák egy része irregulárisan - ma úgy mondanánk kaotikusan - viselkedik, és hosszú idő elteltével sem válik periodikussá vagy kvázi-periodikussá. Az ilyen megoldásokról kimutatta, hogy azok rövidebb-hosszabb ideig a rendszer periodikus pályáinak közelében mozognak, és időben felbonthatók olyan szakaszokra, melyeken jól közelíthetők a közelben futó periodikus pályákkal. Úgy fogalmazott, hogy a periodikus pályák alkotják a klasszikus mozgás vázát.

Steven Smale a hatvanas évek közepén a dinamikai rendszerek strukturális stabilitásával kapcsolatban fedezi fel újra a periodikus pályákat. Strukturálisan stabilak azok a dinamikai rendszerek, melyekben a megoldások topológiai tulajdonságai nem változnak meg az egyenletek kis mértékű megváltoztatása esetén. Smale kimutatta, hogy nemcsak egyszerű reguláris attraktorokkal (pl. fixpont vagy határciklus) rendelkező rendszerek lehetnek strukturálisan stabilak, de irreguláris (kaotikus) megoldásokkal rendelkező rendszerek esetén is adott ilyen példát, melyet Smale féle patkónak neveznek. A strukturális stabilitás vizsgálata esetén azért fontosak a periodikus pályák, mert amennyiben két dinamikai rendszer topológiailag azonos, akkor periodikus pályáik közt egy-egy megfeleltetés hozható létre. A periodikus pályák leszámolására Smale egy zeta függvényt [Smale 1965] javasolt bevezetni,

$$\zeta^{-1}(s) = \prod_p (1 - e^{-sT_p}), \quad (1.4)$$

ahol  $T_p$  a primitív periodikus pályák hossza (periódus ideje). A zeta függvény reciprokának első zérushelye ( $s = h$ ) megadja, hogy a periodikus pályák

száma milyen ütemben növekszik a pályák hosszával,

$$h = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \log(N(T)),$$

ahol  $N(T)$  a  $T$ -nél rövidebb periodikus pályák száma. Ezt a mennyiséget topologikus entrópiának is nevezik. A strukturális stabilitás szükséges feltétele a topologikus entrópia kis perturbációkra való érzéketlensége.

A zeta függvény elnevezés a Riemann féle zeta függvénnyel mutatott analógiából származik. A Riemann zeta függvény reciproka ismert módon az Euler féle végtelen szorzat alakba írható,

$$\zeta^{-1}(s) = \prod_p \left(1 - \frac{1}{p^s}\right), \quad (1.5)$$

ahol  $p$  a prím számokat jelöli. A Riemann zeta függvény felfogható mint egy olyan dinamikai rendszer, melyben a primitív periodikus pályák hossza éppen a prím számok logaritmusával egyezik meg,  $T_p = \log p$ .

David Ruelle és Marc Pollicott a nyolcvanas években kaotikus dinamikai rendszerek keverési tulajdonságait vizsgálta. A dinamikai rendszerek keverését a korrelációs függvények exponenciális esési rátái adják meg. Ezek a ráták a klasszikus pályák sűrűségét időben fejlesztő Liouville vagy Perron-Frobenius egyenlet sajátértékei. Ruelle 1986-ban egy olyan zeta függvényt [Ruelle 1986] vezetett be, melynek zérus helyei ezekkel a sajátértékekkel az ún Pollicott rezonanciákkal [Pollicot 1986] vannak kapcsolatban,

$$\zeta(s) = \prod_p \left(1 - \frac{e^{-sT_p}}{|\Lambda_p|}\right), \quad (1.6)$$

ahol  $T_p$  a primitív pályák periódus ideje,  $\Lambda_p$  pedig a pálya stabilitási mátrixának legnagyobb sajátértéke.

A periodikus pálya elmélet Gutzwiller illetve Smale és Ruelle nevével fémjelzett, egymástól lényegében független vonulatait André Voros 1988-as cikke [Voros 1988] egyesítette, melyben megmutatta, hogy a szemiklasszikus Gutzwiller trace formula leszármaztatható egy Ruelle típusú zeta függvényből,

$$\zeta(E) = \prod_p \left(1 - \frac{e^{\frac{i}{\hbar} S_p(E) + i\pi\mu_p/4}}{|\Lambda_p|^{1/2}}\right). \quad (1.7)$$

Ennek a zeta függvénynek a zérus helyei a klasszikusan kaotikus rendszer energiaszintjeivel egyeznek meg szemiklasszikus közelítésben.

A Voros zeta függvény megjelenése fontos állomás volt, mert általa lehetővé vált a dinamikai rendszerekre kifejlesztett matematikai apparátus kvantummechanikai felhasználása. Gaspard és Rice 1989-ben a kémiai reakciók egy idealizált, három egyforma diszk között pattogó részecskéből álló modelljét [Gaspard, Rice 1989] vizsgálta meg. A Voros zeta függvényt felhasználva sikeresen meghatározták szemiklasszikus közelítésben a rendszer szórási rezonanciáit. A szemiklasszikus rezonanciák helyei a komplex energia síkon 1-2% pontosságon belül megegyeztek a rendszer egzakt kvantummechanikai rezonanciáival. Ez a munka bebizonyította, hogy a periodikus pálya formalizmus nem csupán formális manipulációkra alkalmas, de segítségével konkrét számítások is végezhetők. Ezzel lényegében egyidőben Wintgen[Wintgen 1988] sikeresen alkalmazta az elméletet a Hélium atom energiaszintjeinek és rezonanciáinak szemiklasszikus meghatározására megválaszolva a Bohr, Sommerfeld és Einstein által hetven évvel korábban feltett kérdések többségét.

Ezt követően rövid idő leforgása alatt óriási mennyiségű publikáció született a periodikus pálya alapú szemiklasszikus kvantálás témakörében. Ezek, a teljesség igénye nélkül, a következő témakörökbe sorolhatók:

- A klasszikus és kvantum káoszt jellemző periodikus pálya formulák közti analógia;
- A trace formulák matematikai problémáinak (pl. konvergencia, unitaritás) kezelése;
- A kvantummechanikai energiaszintek statisztikus tulajdonságainak levezetése a periodikus pályák statisztikus tulajdonságaiból;
- Mezozkopikus jelenségek periodikus pálya leírása;
- A szemiklasszikus elmélet kvantum korrekcióinak kidolgozása;
- Az elmélet zaj hatásának kitett kaotikus rendszerekre való általánosítása.

A következő fejezetekben áttekintjük a periodikus pálya elmélet legfontosabb egyenleteit a klasszikus és kvantummechanikában. A három diszk rendszer példáján bemutatjuk az egyenletek numerikus kiértékelésének módszerét is. Ezeknek a fejezeteknek a célja, hogy támpontokat nyújtsanak a

disszertáció anyagának megértéséhez. Semmiképpen nem célja, hogy matematikai értelemben pontos levezetéseket adjon, vagy ilyen értelemben diszkutálja az eredmények érvényességét. A fejezetek forrásai a következő művek voltak: [Artuso, Aurell, Cvitanović 1990], [Cvitanović, Rosenqvist, Vattay, Rugh 1993], [Cvitanović, Eckmann, Gaspard 1995], [Cvitanović, Eckhardt 1991], amelyekben további hivatkozások is találhatóak. Részletesebb levezetések találhatóak még a [Classical and Quantum Chaos] című, a periodikus pálya elméletbe bevezető tankönyvünkben is.

## 1.1. Klasszikus mechanika

A klasszikusan kaotikus mechanikai rendszerek statisztikus leírásának egyik központi problémája a fizikai mennyiségek átlagainak kiszámítása. Ebben a fejezetben azt mutatjuk meg, hogy hogyan lehet kiszámítani ezeket az átlagokat a periodikus pálya elmélet segítségével.

### 1.1.1. A sűrűségfüggvény időfejlődése

Tekintsünk egy Hamilton egyenletekkel leírt autonóm mechanikai rendszert. A rendszert  $2f$  számú koordináta ill. impulzus változó  $(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f)$  megadásával jellemezhetjük. Az energia megmaradás törvényének kihasználásával a változók és egyenletek száma eggyel csökkenthető. Bevezethető  $2f - 1$  darab új változó,  $x = (x_1, \dots, x_{2f-1})$ , ami a mozgást a fázistér egy állandó energiájú alterén  $(\mathcal{M})$  jellemzi. Ezek eleget tesznek egy

$$\dot{x} = F(x) \tag{1.8}$$

alakú differenciálegyenletnek. Megoldva az egyenleteket a rendszer időfejlődése megadható

$$x(t) = f^t(x_0) \tag{1.9}$$

alakban, ahol  $x(t) = (x_1(t), \dots, x_{2f-1}(t))$ ,  $x_0 = (x_1(0), \dots, x_{2f-1}(0))$  a kezdeti feltétel és  $f^t(x)$  a kezdeti feltételt a  $t$  idővel későbbi pontba transzformáló leképezés.

A rendszert statisztikus szempontból úgy írhatjuk le, hogy egy általunk választott  $\varrho_0(x)$  sűrűségfüggvény szerint sok kezdeti feltételt generálunk és tanulmányozzuk az ezekből indított pályák későbbi  $\varrho^t(x)$  eloszlását. Felírhatjuk a pályák számának megmaradását kifejező

$$\varrho^t(y) |dy| = \varrho_0(x) |dx| \tag{1.10}$$

egyenletet, ahol  $y = f^t(x)$ , és  $dx$  ill.  $dy$  jelöli az  $x$  ill.  $y$  körüli kis térfogat elemek irányított térfogatát. Ez az egyenlet a  $\det Df^t(x) = dy/dx$  Jacobi determináns segítségével a

$$\varrho^t(x) = \frac{\varrho_0(f^{-t}(x))}{|\det Df^t(f^{-t}(x))|} \quad (1.11)$$

alakra hozható, ahol  $f^{-t}(x)$  az  $x$  kezdeti feltételből indított és időben visszafelé fejlesztett megoldást jelenti ( $x = f^t(f^{-t}(x))$ ). Az (1.11) egyenlet segítségével a sűrűségfüggvény minden időpontban előállítható.

Az (1.11) egyenlet felírható még a szokásos Dirac delta jelölés segítségével is

$$\varrho^t(x) = \int_{\mathcal{M}} \delta(x - f^t(y)) \varrho_0(y) dy \quad (1.12)$$

alakban. Ennek az alaknak az az előnye, hogy a benne szereplő delta függvényt tekinthetjük egy lineáris, Fredholm szerű operátor magfüggvényének,

$$\varrho^t(x) = \int_{\mathcal{M}} \mathcal{L}^t(x, y) \varrho_0(y) dy, \quad (1.13)$$

ahol  $\mathcal{L}^t(x, y) = \delta(x - f^t(y))$ . Ezt az operátort általában Perron-Frobenius operátornak nevezik.

Ha rendszerünk ergodik és zárt, akkor a sűrűségfüggvény hosszú idő eltelte után egy stacionárius eloszláshoz ( $\varrho_{st}(x)$ ) konvergál. Ha eleve a stacionárius eloszlás szerint indítjuk a pályákat, akkor a sűrűségfüggvény időben nem változik. Ezt fejezi ki a stacionárius eloszlásra felírható

$$\varrho_{st}(x) = \int_{\mathcal{M}} \mathcal{L}^t(x, y) \varrho_{st}(y) dy \quad (1.14)$$

egyenlet, mely úgy is interpretálható, hogy a stacionárius eloszlás a Perron-Frobenius operátor  $\lambda = 1$  sajátértékhez tartozó sajátfüggvénye. A stacionárius eloszlást természetes mértéknek is nevezik, mert  $\varrho_{st}(x) dx$  megadja egy időben hosszú pálya  $x$  pont körüli megtalálási valószínűségét.

### 1.1.2. Az átlagolás

Most térjünk rá egy  $A$  fizikai mennyiség átlagának kiszámítására.  $A$  idő átlagán az

$$\bar{A}(x) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt A(f^t(x)) \quad (1.15)$$

mennyiséget értjük, ahol  $x$  egy pálya kezdőpontja. Ez a mennyiség általában függ az  $x$  kezdőponttól. Ergodikus rendszerekben azonban majdnem minden kezdeti feltétel esetén ugyanazt az eredményt kapjuk. Hogy elkerüljük a bizonytalanságot, és hogy átlagolhassunk nem szigorúan ergodikus rendszerekben is, célszerű sok kezdeti értékre kiszámítani az időátlagot és a különböző kezdeti feltételekre is átlagolni. Legyen a kezdeti feltételek eloszlása ismét  $\varrho_0(x)$ . Az  $A$  idő és kezdeti feltételekre vett átlagát ekkor az

$$\langle A \rangle = \int_{\mathcal{M}} dx \bar{A}(x) \varrho_0(x) \quad (1.16)$$

módon definiálhatjuk. Az átlag (1.15) és (1.16) segítségével történő meghatározása azonban nehezen kivitelezhető az időátlag rendkívül lassú, tipikusan  $T^{-1/2}$  szerinti konvergenciája miatt. Az átlag kiszámítását ezért más módszerrel végezzük el.

Az (1.15) definíciót felhasználva az (1.16) egyenletet a következőképpen is írhatjuk:

$$\langle A \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{\mathcal{M}} dx \int_0^T dt A(f^t(x)) \varrho_0(x). \quad (1.17)$$

Bevezetve egy  $\beta$  segédváltozót, ezt átírhatjuk a következő módon:

$$\langle A \rangle = \left[ \frac{\partial}{\partial \beta} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{\mathcal{M}} dx \varrho_0(x) e^{\beta \int_0^T dt A(f^t(x))} \right]_{\beta=0}. \quad (1.18)$$

Ezt az egyenletet – a határérték képzést elhagyva – úgy fogalmazhatjuk át, hogy nagy  $T$  és kis  $\beta$  értékek esetén fenn kell állnia asszimptotikusan a

$$G(\beta, T) \sim e^{\beta \langle A \rangle T} \quad (1.19)$$

arányosságnak, ahol

$$G(\beta, T) = \int_{\mathcal{M}} dx \varrho_0(x) e^{\beta \int_0^T dt A(f^t(x))}. \quad (1.20)$$

Vezessük be az

$$s(\beta) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log G(\beta, t) \quad (1.21)$$

mennyiséget. Összevetve (1.21)-et (1.19)-cel megállapíthatjuk, hogy  $s_0(\beta) \approx \beta \langle A \rangle$ , amennyiben  $\beta \rightarrow 0$ . Így az átlag megkapható  $s_0$  deriválásával:

$$\langle A \rangle = s'(0). \quad (1.22)$$



Itt megemlíthetjük, hogy további deriválásokkal az  $A$  mennyiség magasabb rendű momentumaihoz juthatunk, és  $s(\beta)$  nem más mint az  $A$  eloszlásához tartozó momentum generátor függvény.

Most rátérünk a generátor függvény kiszámítására. Az (1.20) kifejezést alakítsuk át felhasználva az

$$1 = \int_{\mathcal{M}} dy \delta(y - f^t(x))$$

azonosságot:

$$G(\beta, t) = \int_{\mathcal{M}} dx \varrho_0(x) \int_{\mathcal{M}} dy e^{\beta \int_0^t d\tau A(f^\tau(x))} \delta(y - f^t(x)). \quad (1.23)$$

Hasonlóan mint (1.13)-ben, most is bevezethetünk egy olyan lineáris operátort, amely a Perron-Frobenius operátor egy általánosítása:

$$\mathcal{L}^t(y, x) = e^{\beta \int_0^t d\tau A(f^\tau(x))} \delta(y - f^t(x)). \quad (1.24)$$

Ennek segítségével (1.23) a következő módon írható:

$$G(\beta, t) = \int_{\mathcal{M}} dy \int_{\mathcal{M}} dx \mathcal{L}^t(y, x) \varrho_0(x). \quad (1.25)$$

Ennek a felírásnak az az előnye, hogy tovább alakításához felhasználhatjuk az  $\mathcal{L}$  operátor spektrális felbontását. Az  $\mathcal{L}$  operátor sajátfüggvényeit formálisan jelöljük  $\varphi_k(x)$ -el. (A "formális" szót azért használjuk itt, mert ezek általában nem feltétlenül reguláris függvények, és a spektrum folytonos is lehet.) A sajátfüggvények kielégítik az

$$e^{s_k t} u_k(y) = \int_{\mathcal{M}} dx \mathcal{L}^t(y, x) \varphi_k(x) \quad (1.26)$$

egyenletet, ahol az  $s_k$ ,  $k = 0, 1, \dots$  sajátértékek a  $\beta$  paraméter függvényei. A  $\varrho_0$  függvényt a  $c_k$  együtthatók segítségével kifejtve a sajátfüggvények szerint, az operátor hatását felírhatjuk az

$$\int_{\mathcal{M}} dx \mathcal{L}^t(y, x) \varrho_0(x) = \sum_{k=0}^{\infty} e^{s_k t} c_k \varphi_k(y) \quad (1.27)$$

alakban. Ezt a sort nagy  $t$  értékekre a legnagyobb valós résszel rendelkező sajátérték dominálja. Legyen ez  $s_0$ . Ekkor nagy  $t$  esetén

$$G(\beta, t) \sim \int_{\mathcal{M}} dy c_0 e^{s_0 t} \varphi_0(y) \sim e^{s_0 t}, \quad (1.28)$$

és az (1.21) határátmenet után az  $s(\beta) = s_0(\beta)$  eredményre jutunk.

Az átlagolás problémáját ilyen módon visszavezettük egy operátor domináns sajátértékének meghatározására. Ez azért hasznos, mert a sajátértékek meghatározására rendkívül hatékony módszerek léteznek. Ellentétben az időátlagolás algebrai konvergencia rátájával, a következő fejezetben ismertett módszer lehetővé teszi a gyors, tipikusan exponenciálisan vagy szuperexponenciálisan konvergáló átlagolást.

### 1.1.3. A klasszikus trace formula

Amint említettük, a (1.26) sajátvektorok és sajátértékek meghatározása matematikai nehézségekbe ütközhet. Ezért a sajátértékek megkeresésének alternatív útjait keressük, ahol a fizikai intuíció is felhasználhatóvá válik. A módszer lényege, hogy első lépésben nem a sajátérték egyenletet vizsgáljuk meg, hanem az operátor nyomát számítjuk ki. Ezt megtehetjük a sajátvektorok explicit kiszámítása nélkül is. Az operátor nyomát (trace) úgy kaphatjuk meg, hogy egybeejtjük az  $x$  és  $y$  változókat, és integráljuk az így kapott kifejezést:

$$\mathrm{Tr}\mathcal{L}^t = \int_{\mathcal{M}} dx \mathcal{L}^t(x, x) = \int_{\mathcal{M}} dx e^{\beta \int_0^t d\tau A(f^\tau(x))} \delta(x - f^t(x)). \quad (1.29)$$

Másrészt az operátor nyoma felírható a sajátértékek összegeként is

$$\mathrm{Tr}\mathcal{L}^t = \sum_k e^{s_k t}. \quad (1.30)$$

A két kifejezés összevetéséből a sajátértékek már meghatározhatók.

Az (1.29) integrál a delta függvény miatt csak olyan pontokból vesz fel járulékot, melyekre  $x - f^t(x) = 0$ . Ez csak akkor állhat fenn, ha  $x$  egy olyan periodikus pályára esik, melynek periódus ideje vagy annak egész számú többszöröse éppen  $t$ . Ezért az (1.29) integrált felbonthatjuk az egyes periodikus pályákból származó járulékok összegére:

$$\mathrm{Tr}\mathcal{L}^t = \sum_p \int_{V_p} dx e^{\beta \int_0^t d\tau A(f^\tau(x))} \delta(x - f^t(x)), \quad (1.31)$$

ahol  $V_p$  a  $p$ -vel indexelt primitív (egyszeresen körüljárt) periodikus pálya körül vett kicsiny tubust jelöli.

Az egyes primitív periodikus pályák járulékát úgy a legegyszerűbb kiszámítani, ha a pálya környezetében új általános koordinátákat vezetünk be. Legyen  $x_{\parallel}$  a (1.8) differenciálegyenlet jobb oldala által meghatározott sebességtér áramvonalalaival (így a periodikus pályával is) párhuzamos koordináta, és jelölje  $x_{\perp} = (u_1, u_2, \dots, u_{2f-2})$  az áramvonalakra merőleges irányokban vett tetszőleges koordinátákat. Ebben a speciális koordináta-rendszerben elegendően közel a periodikus pályához az egyes kis tubusokban az integrál delta függvénye felbontható a longitudonális és perpendikuláris delta függvényekre:

$$\text{Tr} \mathcal{L}_p^t = \int_{V_p} dx_{\parallel} dx_{\perp} e^{\beta \int_0^t d\tau A(f^{\tau}(x))} \delta_{\parallel}(x - f^t(x)) \delta_{\perp}(x - f^t(x)). \quad (1.32)$$

Az integrál mindannyiszor járulékot vesz fel, amikor a pálya visszatér a kiindulási pontjába. Ez diszkrét  $t = rT_p$  időnként következik be, ahol  $T_p$  a periódus idő és  $r = 1, 2, \dots$  a repetíciós szám. A perpendikuláris integrál ezekben az időpontokban elvégezhető:

$$\int dx_{\perp} e^{\beta \int_0^{rT_p} d\tau A(f^{\tau}(x))} \delta_{\perp}(x - f^{rT_p}(x)) = \frac{e^{r\beta A_p}}{|\det(\mathbf{1} - \mathbf{J}_{\mathbf{p}}^r)|}, \quad (1.33)$$

ahol  $A_p = \int_0^{T_p} dt A(f^t(x_p))$  az átlagolt mennyiség integrálja a periodikus pálya mentén,  $x_p$  a periodikus pálya egy tetszőleges pontja,  $\mathbf{J}_{\mathbf{p}} = Df^{T_p}(x_p)$  a periodikus pálya  $(2f-2) \times (2f-2)$  dimenziós Jacobi stabilitási mátrixa. Mind  $A_p$  mind a Jacobi mátrix sajátértékei függetlenek attól, hogy a pálya melyik  $x_p$  pontját használjuk kezdőpontként. A longitudonális integrálásból származó járulék kiszámításához vezessük be az  $x_{\parallel} = v dt'$  paraméterezést, ahol  $v = |F(x)|$  a pálya menti sebesség. Mindannyiszor, amikor  $t'$  a periódus időnek egész számú többszöröse, a longitudonális delta függvény egy  $1/v$  járulékot ad, amit a változócserekor megjelenő  $v$  kiejt. A  $t'$  pálya menti integrálja pedig éppen  $T_p$ :

$$\int_{V_p} dx_{\parallel} \delta_{\parallel}(x - f^t(x)) = \sum_{r=1}^{\infty} \delta(t - rT_p) \int_p dt' = T_p \sum_{r=1}^{\infty} \delta(t - rT_p). \quad (1.34)$$

Az (1.34), (1.33) és (1.31) összevetéséből adódik az ún. *klasszikus trace formula*:

$$\text{Tr} \mathcal{L}^t = \sum_p T_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{e^{r\beta A_p}}{|\det(\mathbf{1} - \mathbf{J}_{\mathbf{p}}^r)|} \delta(t - rT_p). \quad (1.35)$$

A sajátértékeket úgy határozhatjuk meg, hogy összevetjük a trace (1.30) és (1.35) kifejezéseinek Laplace transzformáltjait. Ez egyrészt

$$\mathrm{Tr}\mathcal{L}(s) = \int_0^{+\infty} dt \mathrm{Tr}\mathcal{L}^t e^{-st} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{s - s_k}, \quad (1.36)$$

ha  $\mathrm{Re}(s) > \mathrm{Re}(s_k)$  minden  $k$  esetén, másrészt

$$\mathrm{Tr}\mathcal{L}(s) = \int_0^{+\infty} dt \mathrm{Tr}\mathcal{L}^t e^{-st} = \sum_p T_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{e^{r\beta A_p - srT_p}}{|\det(\mathbf{1} - \mathbf{J}_p^r)|}. \quad (1.37)$$

A sajátértékek tehát (1.36) szerint a (1.37) kifejezés pólusai. Bevezethetjük a

$$Z(s) = \exp\left(-\sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r} \frac{e^{r\beta A_p - srT_p}}{|\det(\mathbf{1} - \mathbf{J}_p^r)|}\right) \quad (1.38)$$

zeta függvényt, melynek logaritmikus deriváltja éppen az (1.37) kifejezés:

$$\mathrm{Tr}\mathcal{L}(s) = \frac{d}{ds} \log Z(s) = Z'(s)/Z(s). \quad (1.39)$$

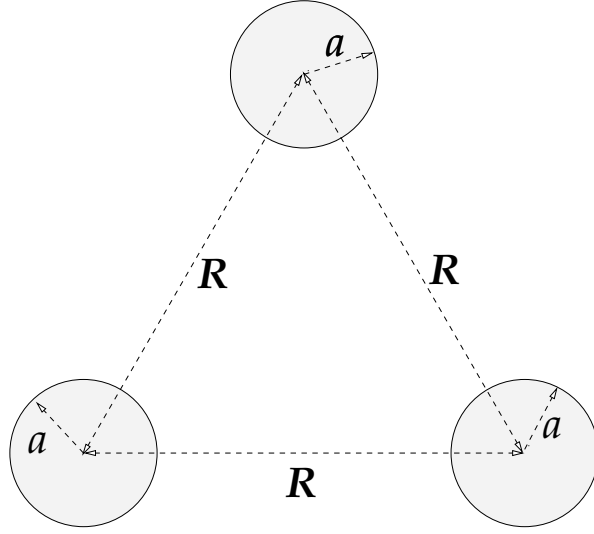
Feltéve, hogy  $Z(s)$  egy holomorf függvény, a trace Laplace transzformáltjának pólusai éppen (1.38) zérushelyei lesznek ( $Z(s_k) = 0$ ). Ezen tulajdonsága miatt kapta (1.38) a spektráldetermináns elnevezést. Így a kaotikus rendszerek átlagainak kiszámítását visszavezettük a periodikus pályák segítségével kiszámítható spektráldetermináns meghatározásának problémájára.

A következő alfejezetben egy konkrét példán szemléltetjük, hogy hogyan lehet meghatározni a sajátértékeket.

#### 1.1.4. Szökési ráta a három diszk rendszerben

A periodikus pálya formulák működésének bemutatására az egyik leggyakrabban említett példa az 1.1 ábrán bemutatott három tömör diszk [Eckhardt 1987], melyek között egy kis golyó pattog. Egy, a diszkek közé belőtt golyó, hosszabb rövidebb, a diszkek közötti pattogással eltöltött idő után véglegesen távozik.  $N(0)$  darab véletlenszerű irányokból belőtt golyó közül  $N(t)$  darab tölt  $t$ -nél hosszabb időt a rendszerben. Azt tapasztaljuk, hogy a túlélő golyók száma exponenciálisan csökken:

$$N(t) \sim e^{-\gamma t}, \quad (1.40)$$



1.1. ábra: A három diszk rendszer.

ahol  $\gamma$ -t szökési rátának nevezzük.

A fázistér egy adott  $\mathcal{M}_0$  tartományából való kiszökés rátáját meghatározhatjuk az előző alfejezetekben ismertetett formalizmus segítségével. Legyen  $\varrho_0(x)$  a véletlenszerű kezdőfeltételek eloszlásfüggvénye. Az  $\mathcal{M}_0$  tartományban a  $t$  időpontban tartózkodó pontok számát az alábbi kettős integrál adja meg:

$$N \int_{\mathcal{M}_0} dx' \int_{\mathcal{M}} dx \delta(x' - f^t(x)) \varrho_0(x) = N \int_{\mathcal{M}_0} dx' \int_{\mathcal{M}} dx \mathcal{L}^t(x', x) \varrho_0(x). \quad (1.41)$$

A szokásos módon (ld. (1.27)) az  $\mathcal{L}^t$  spektrális felbontását beírva, arra jutunk, hogy nagy  $t$  esetén a viselkedést a domináns sajátérték határozza meg:

$$\int_{\mathcal{M}_0} dx' \int_{\mathcal{M}} dx \mathcal{L}^t(x', x) \varrho_0(x) \sim e^{s_0 t}. \quad (1.42)$$

Innen a szökési ráta már leolvasható, és azt a domináns sajátérték adja:  $\gamma = -s_0$ . Ez a sajátérték a

$$Z(s) = \exp \left( - \sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r} \frac{e^{-srT_p}}{|\det(\mathbf{1} - \mathbf{J}_p^r)|} \right) \quad (1.43)$$

spektráldetermináns legnagyobb valós résszel rendelkező zérushelye. A kétdimenziós mechanikai rendszerek esetén a spektráldetermináns még egyszerűbb alakra hozható. A fázistér fogat Liouville féle megmaradási törvényének segítségével tetszőleges dimenziószám esetén megmutatható, hogy a Jacobi mátrix determinánsa:  $\det \mathbf{J}_p = 1$ . Kétdimenzióban a Jacobi mátrix egy  $2 \times 2$ -es mátrix. Így a mátrix sajátértékei mindig egymás reciprokai. Mivel a mátrix nyoma egy valós szám, a sajátértékek összegének valósnak kell lennie. Ez a két feltétel azt okozza, hogy kétdimenziós mechanikai rendszerekben a Jacobi mátrix sajátértékei vagy konjugált egységgyökök, vagy  $\Lambda_p, 1/\Lambda_p$  valós párok. Erősen kaotikus, ún. hiperbolikus rendszerekben minden periodikus pálya instabil, így minden periodikus pálya esetén ez utóbbi eset valósul meg. Mindig választhatjuk  $\Lambda_p$ -t úgy, hogy az abszolút értéke egynél nagyobb legyen. A Jacobi mátrix sajátértékeinek segítségével a (1.43) spektráldetermináns az egyszerűbb

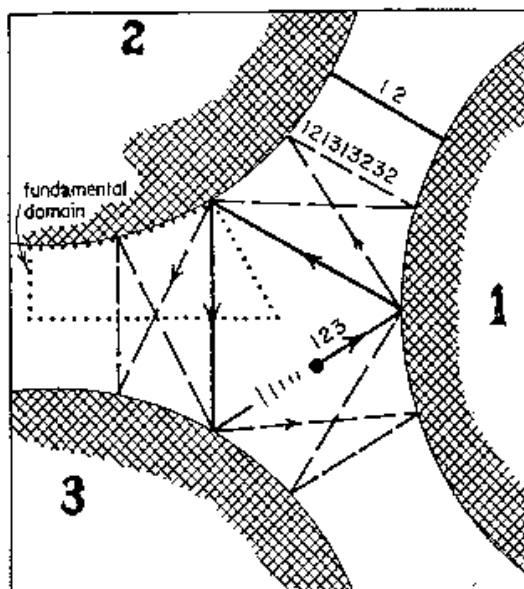
$$Z(s) = \exp \left( - \sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r} \frac{e^{-srT_p}}{|\Lambda_p^r| \left(1 - \frac{1}{\Lambda_p^r}\right)^2} \right) \quad (1.44)$$

alakra hozható, ahol felhasználtuk, hogy  $|\det(\mathbf{1} - \mathbf{J}_p^r)| = |(1 - \Lambda_p^r)(1 - 1/\Lambda_p^r)|$ .

A spektráldetermináns zérushelyének meghatározásánál valamilyen numerikus vagy közelítő módszerhez kell folyamodnunk, hiszen a kaotikus rendszerek periodikus pályáinak száma végtelen. A  $T$  periódus időnél rövidebb primitív pályák száma tipikusan  $e^{hT}/T$ -vel arányos, ahol a  $h > 0$  számot topologikus entrópiának nevezzük. Az általunk vizsgált három diszk rendszerben is ez a helyzet, ezért most egy kitérőt teszünk, és tanulmányozzuk a periodikus pályák tulajdonságait.

### 1.1.5. Periodikus pályák a három diszk rendszerben

A 1.2 ábra a három diszk rendszer néhány rövid periodikus pályáját mutatja. A pontosan  $n$  ütközést végző periodikus pályák száma könnyen meghatározható. A diszkeket az 1, 2, 3 szimbólumokkal megjelölve azt tapasztaljuk, hogy a periodikus pályákat egyértelműen kódolja az egymást követően érintett diszkek szimbólum sorozata. A szimbólum sorozatok közül pedig mindegyik előfordul, kivéve azokat, amelyekben kétszer egymás mellé kerül ugyanaz a szimbólum, hiszen ekkor a golyónak kétszer kellene ugyanazzal a diszkekkel ütköznie, ami nem lehetséges. Így általában  $3 \cdot 2^{n-1}$  megengedett  $n$  hosszúságú sorozatot generálhatunk, és a periodikus pályák száma is  $\sim 2^n$



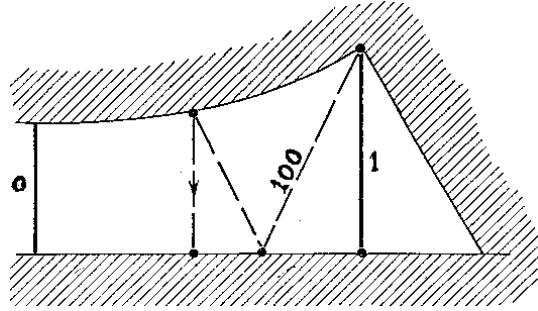
1.2. ábra: Periodikus pályák a teljes három diszk rendszerben.

szerint növekszik. A periodikus pályákat könnyebb áttekinteni a három diszk rendszer szimmetria redukált változatában (ld. 1.3 ábra), ahol az eredeti rendszerben a szimmetria tengelyeken áthaladó pályákat a szimmetria tengelyen reflektáltatjuk. A szimmetria redukált rendszerben már elég két szimbólumot (0 és 1) bevezetnünk. A 0 szimbólumot olyan ütközésekhez rendeljük, amikor az ütközés után újból visszatérünk a kiindulási diszkhez, míg az 1 szimbólumot akkor rendeljük az ütközéshez, ha az nem tér vissza, hanem a harmadik diszkre irányul. Így például a ...232323... eredeti szimbólumokhoz a szimmetria redukált esetben a ....00000.... szimbólumok tartoznak, az ...123123... szimbólumokhoz pedig az ...11111... szimbólumok. Az 1.1 táblázatban felsoroltuk a három diszk rendszer szimmetria redukált változatának numerikusan meghatározott legrövidebb primitív periodikus pályáit. A pályákat szimbólum sorozatukon kívül periódus idejük ( $T_p$ ) és stabilitási mátrixuk sajátértéke ( $\Lambda_p$ ) jellemzi.

$p$	$\Lambda_p$	$T_p$
0	9.898979485566	4.000000000000
1	$-1.177145519638 \times 10^1$	4.267949192431
01	$-1.240948019921 \times 10^2$	8.316529485168
001	$-1.240542557041 \times 10^3$	12.321746616182
011	$1.449545074956 \times 10^3$	12.580807741032
0001	$-1.229570686196 \times 10^4$	16.322276474382
0011	$1.445997591902 \times 10^4$	16.585242906081
0111	$-1.707901900894 \times 10^4$	16.849071859224
00001	$-1.217338387051 \times 10^5$	20.322330025739
00011	$1.432820951544 \times 10^5$	20.585689671758
00101	$1.539257907420 \times 10^5$	20.638238386018
00111	$-1.704107155425 \times 10^5$	20.853571517227
01011	$-1.799019479426 \times 10^5$	20.897369388186
01111	$2.010247347433 \times 10^5$	21.116994322373
000001	$-1.205062923819 \times 10^6$	24.322335435738
000011	$1.418521622814 \times 10^6$	24.585734788507
000101	$1.525597448217 \times 10^6$	24.638760250323
000111	$-1.688624934257 \times 10^6$	24.854025100071
001011	$-1.796354939785 \times 10^6$	24.902167001066
001101	$-1.796354939785 \times 10^6$	24.902167001066
001111	$2.005733106218 \times 10^6$	25.121488488111
010111	$2.119615015369 \times 10^6$	25.165628236279
011111	$-2.366378254801 \times 10^6$	25.384945785676

1.1. táblázat: A három diszk rendszer periodikus pályáinak adatai a szimmetria redukált esetben max. 6 ütközésig,  $R = 6$  és  $a = 1$  paraméterek mellett. Feltesszük, hogy a pattogó golyó sebessége egységnyi ( $v = 1$ ).





1.3. ábra: Periodikus pályák a szimmetria redukált három diszk rendszerben.

### 1.1.6. Kummuláns kifejtés

A spektráldetermináns kiértékeléséhez figyelembe kell venni a periodikus pályákkal kapcsolatban gyűjtött tapasztalatainkat. Az 1.1 táblázatból kiderül, hogy a pályák száma a pattogások számával gyorsan nő. Gyakorlatilag lehetetlen 15-20 ütközésen túl numerikusan meghatározni a periodikus pályákat. Olyan módszert kell tehát választani, ami a rendelkezésre álló információt hatékonyan használja fel. Ennek érdekében a spektráldetermináns egy olyan kifejtését konstruáljuk meg, ami lehetővé teszi, hogy a csak valamilyen maximális pattogási számig rendelkezésre álló primitív pályákkal kellően pontos számításokat végezhessünk. Jelölje  $n_p$  a  $p$  primitív periodikus pálya pattogásainak számát. Vezessünk be egy  $z$  "könyvelő" segédváltozót. A spektráldetermináns minden egyes periodikus pályához tartozó tagja mellé írjuk oda a  $z^{rn_p}$  hatványt, ami nyilvántartja, hogy az adott periodikus pálya hány pattogáshoz tartozik, és vezessünk be egy új spektráldeterminánst:

$$Z(s, z) = \exp \left( - \sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{z^{rn_p}}{r} \frac{e^{-srT_p}}{|\det(\mathbf{1} - \mathbf{J}_p^r)|} \right). \quad (1.45)$$

Ez  $z = 1$  esetén visszaadja az eredeti spektráldeterminánst. Előnye, hogy a spektráldeterminánst  $z$  szerint hatványsorba fejtve, azt a pattogási szám szerinti sor alakjában állíthatjuk elő. A  $z$  szerinti kifejtést a spektráldetermináns kummuláns sorfejtésének nevezzük:

$$Z(s, z) = 1 - \sum_{k=1}^{\infty} Q_k(s) z^k, \quad (1.46)$$

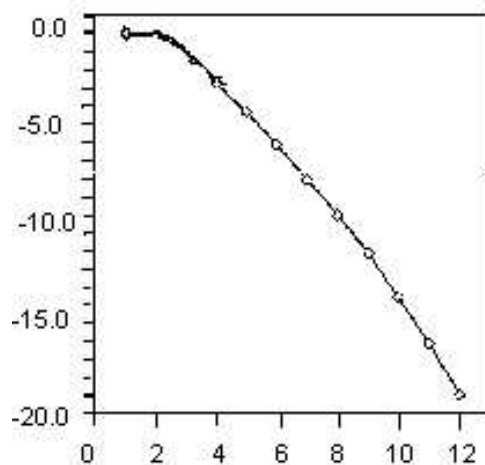
ahol a  $Q_k(s)$  kummulánsok csak a  $k$  vagy annál kevesebbet ütköző periodikus pályáktól függenek. Amennyiben a kummulánsok elegendően gyorsan csökkennek, a sort egy kellően nagy  $k_{max}$  tagjánál megállhatunk, és  $z = 1$ -et visszahelyettesítve, a zérus helyeket a

$$0 = 1 - \sum_{k=1}^{k_{max}} Q_k(s) \quad (1.47)$$

egyenletből határozhatjuk meg. Tapasztalatok szerint, a kummuláns sor konvergenciája gyors. Egyes, a három diszk problémához hasonlóan erősen kaotikus (ún. Axiom A) rendszerek esetén bizonyítást nyert [Rugh 1992], hogy a kummulánsok  $k$  függvényében szuper-exponenciális módon ( $|Q_k| \sim e^{-ck^\alpha}$ ,  $\alpha > 1$ ), csökkennek, ezért az (1.46) sor ilyenkor rendkívül gyorsan konvergál, és már az első néhány tagja is jó közelítést ad. Az (1.4) ábra a kummulánsok esését mutatja a három diszk rendszerre. A kummulánsok szuper-exponenciális konvergenciája esetén a (1.47) zérushelyei is szuper-exponenciális pontossággal határozhatók meg  $k_{max}$  függvényében. Ez azt is jelenti, hogy a fizikai mennyiségek átlagainak konvergenciája szuper-exponenciális a számításba vett leghosszabb periodikus pálya periódus idejének függvényeként is. Az 1.5. ábra a spektráldetermináns zérushelyeit mutatja. A legnagyobb valós résszel rendelkező sajátérték  $s = -0.402\dots + 0 \cdot i$ , amiből a szökési rátára  $\gamma = 0.402\dots$  adódik.

### 1.1.7. Általános rendszerek

A periodikus pálya módszerrel kapcsolatban számos elvi és gyakorlati probléma vár megoldásra a három diszknél generikusabbnak mondható rendszerek esetén. Az első – inkább gyakorlati – probléma egy adott rendszer periodikus pályáinak meghatározása. Erre az elmúlt évtizedben számos módszer született, melyek mára ezt kielégítően megoldják [Biham, Wenzel 1989], [Biham, Wenzel 1990], [Biham, Kvale 1992], [Schmelcher, Diakonios 1997]. Egy ennél súlyosabb probléma az, hogy általában a mechanikai rendszerek fázisterében a kaotikus és reguláris tartományok keverednek. Jó módszerek dolgozhatók ki a reguláris ún. elliptikus szigeteknek a kezelésére is. Azonban a reguláris és kaotikus tartományok határán mindig fellépnek olyan instabil periodikus pályák, melyekre a Jacobi mátrix  $\Lambda_p$  sajátértéke egy egyhez közeli szám. Tipikusan található a periodikus pályáknak olyan sorozata is, melyekhez tartozó  $\Lambda_p$  stabilitások sorozata 1-hez tart. Ezt a jelenséget



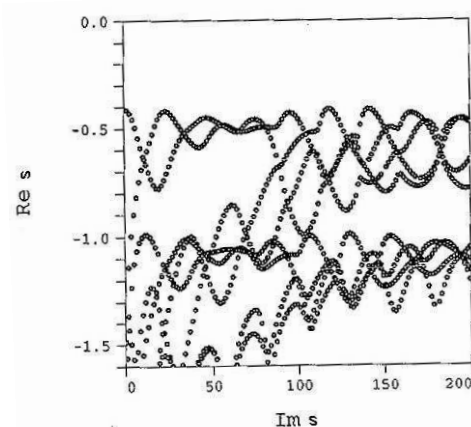
1.4. ábra: A három diszk rendszer ( $a : R = 1 : 3$ ) kummulánsai szemilogaritmusos ábrázolásban ( $\log_{10} |Q_k(s)|$  vs.  $k$ )  $s = -0.3847 + 7.8727i$  mellett. A kummulánsok esése összhangban van egy  $|Q_k| \sim e^{-ck^{3/2}}$  alakú superexponenciális viselkedéssel [Cvitanović, Rosenqvist, Vattay, Rugh 1993].

gyakran intermittenciának nevezik. Ilyenkor az (1.37) trace formula és az (1.43) spektráldetermináns konvergencia tulajdonságai jelentősen romlanak. Az ilyen periodikus pályákból eredő tagokat külön kell kezelni. Az intermittencia kezelésére az elmúlt években számos előremutató eredmény született [Dahlqvist 1997, Dahlqvist 1999(1)], de még további kutatásra van szükség ebben az irányban.

Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy a periodikus pálya módszer lehetőséget ad kaotikus rendszerek spektrális és statisztikai tulajdonságainak meghatározására. Fő üzenete a periodikus pályák és a spektrum mély kapcsolata, dualitása.

## 1.2. Kvantummechanika

A kvantummechanikában központi helyet foglal el az energia sajátértékek kiszámítása. Ezért ebben a fejezetben azt vizsgáljuk meg, hogy a szemi-klasszikus közelítés segítségével hogyan lehet kiszámítani az energia saját-



1.5. ábra: A spektráldetermináns zérus helyei  $k_{max} = 10$  és  $a : R = 1 : 3$  esetén. A bemutatott zérók/sajátértékek ennyi pálya esetén már 8 jegynél pontosabban meghatározhatók. [Cvitanović, Rosenqvist, Vattay, Rugh 1993]

értékeket, illetve nyílt rendszerek esetén a szórési rezonanciákat, melyek az  $S$  mátrix pólus helyei [Balian, Bloch 1974]. A kvantummechanikai formulák szemiklasszikus közelítésének levezetése technikailag lényegesen bonyolultabb mint az előző klasszikus formulák esetén. Ezért ebben a fejezetben kevesebb részletre térünk ki, és csak a formulák levezetésének menetét reprodukáljuk. A levezetések részletei megtalálhatók Reichl könyvében [Reichl 1992] és monográfiánkban [Classical and Quantum Chaos] is.

### 1.2.1. A hullámfüggvény időfejlődése

A kvantummechanikában a hullámfüggvény időfejlődését a Schrödinger egyenlet adja meg. A hullámfüggvény kezdeti  $\psi_0$  és egy későbbi  $\psi^t$  időpontban felvett alakját az időfejlesztő operátor köti össze:

$$\psi^t(x) = \int dx' \mathcal{K}^t(x, x') \psi_0(x'). \quad (1.48)$$

Az időfejlesztő operátornak a  $t = 0$  esetben meg kell egyeznie az egység operátorral:

$$\mathcal{K}^0(x, x') = \delta(x - x'), \quad (1.49)$$

valamint az (1.48) fennállása miatt maga is kielégíti a Schrödinger egyenletet

$$\left( i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2 - U(x) \right) \mathcal{K}^t(x, x') = 0, \quad (1.50)$$

$t > 0$  időpontokra. Az (1.49) kezdeti feltétel és a (1.50) egyenlet elegendő az időfejlesztő operátor meghatározásához. Az időfejlesztő operátor minden  $0 < \tau < t$  közbenső időpontra eleget tesz a

$$\mathcal{K}^t(x, x') = \int dx'' \mathcal{K}^{t-\tau}(x, x'') \mathcal{K}^\tau(x'', x') \quad (1.51)$$

kompozíciós szabálynak. Infinitesimalisan kicsi ( $t \rightarrow 0$ ) időkre az operátor aszimptotikus alakja explicit módon meg is határozható:

$$\mathcal{K}^t(x, x') \approx \left[ \frac{m}{2\pi i\hbar t} \right]^{f/2} e^{\frac{i}{\hbar} \left( \frac{m(x-x')^2}{2t} - U(x)t \right)}. \quad (1.52)$$

Ez az alak a  $t \rightarrow 0$  esetben a delta függvény egy reprezentációja, így helyesen adja vissza az (1.47) kezdeti feltételt is. Az (1.51) kompozíciós szabály ismételt alkalmazásával a propagátor meghatározható a rövid időkre érvényes alakból. Osszuk a  $(0, t)$  intervallumot  $N$  egyenlő  $\delta t = t/N$  nagyságú részre. Így a propagátor Diractól [Dirac 1935] származó

$$\mathcal{K}^t(x, x') = \int \prod_{i=1}^{N-1} dx_i \prod_{i=0}^{N-1} \mathcal{K}^{t/N}(x_i, x_{i+1}) \quad (1.53)$$

alakját kapjuk, ahol  $x_0 = x$  és  $x_N = x'$ . Ha  $N$  nagy, akkor a produktumban szereplő operátorokat helyettesíthetjük az (1.52) alakkal, és így a Feynman-féle pálya integrált kapjuk:

$$\mathcal{K}^t(x, x') = \left[ \frac{m}{2\pi i\hbar t} \right]^{Nf/2} \int \prod_{i=1}^{N-1} dx_i e^{\frac{i}{\hbar} R_N}, \quad (1.54)$$

ahol

$$R_N = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{m(x_i - x_{i+1})^2}{2\delta t} - U(x_i)\delta t, \quad (1.55)$$

a Feynman féle  $(x, x_1, \dots, x_{N-1}, x')$  pálya mentén számított hatás.

Az időfejlesztő operátor (1.54) előállításuk sok egymást potenciálisan erősítő vagy kioltó oszcilláló tagot tartalmaz. Vannak Feynman pályák, melyektől

kicsit eltérő pályákra az (1.55) hatás  $\hbar$ -hoz képest sokat változik, és vele együtt az (1.54) fázisa is nagyot változik. Az ilyen pályák környezetéből származó kontribúciók aztán véletlenszerűek, és kioltják egymást. Pozitív interferencia ott következik be, ahol a fázisok változása kicsi. A fázis a legkevesebbet olyan pályák környezetében változik, melyek minimalizálják az (1.55) hatásfüggvényt. A minimális hatású pályák pedig éppen az  $x$  és  $x'$  pontokat  $t$  idő alatt összekötő klasszikus pályák. Formálisan ezt úgy fogalmazhatjuk meg, hogy a  $\hbar \rightarrow 0$  szemiklasszikus határesetben az (1.54) integrál aszimptotikusan kiértékelhető a nyeregpont (vagy stacionárius fázis) módszerrel, ahol most a nyeregpontok szerepét a klasszikus pályák játsszák. A nyeregpont módszerrel a  $\hbar \rightarrow 0$  szemiklasszikus határesetben kiértékelve az (1.54) integrált a

$$\mathcal{K}_{sc}^t(x, x') = \sum_j \frac{1}{(2\pi i \hbar)^{f/2}} \sqrt{|C_j(x, x', t)|} e^{\frac{i}{\hbar} R_j(x, x', t) + i\pi\nu_j/2} \quad (1.56)$$

Gutzwillertől [Gutzwiller 1967] származó kifejezéshez jutunk, ahol  $j$  az  $x$  és  $x'$  pontokat  $t$  idő alatt összekötő klasszikus pályákat jelöli,  $R_j$  a pálya mentén számított klasszikus hatás, a

$$C(x, x', t) = \left\| -\frac{\partial^2 R(x, x', t)}{\partial x_i \partial x'_j} \right\| \quad (1.57)$$

a hatás vegyes deriváltjaiból alkotott mátrix determinánsának abszolút értéke,  $\nu_j$  pedig egy később részletezett fázis. A  $\nu_j$  fázis és a  $j$  szummázás nélkül ezt a kifejezést Van Vleck vezette le [Van Vleck 1928] a Schrödinger egyenlet szemiklasszikus sorfejtésének segítségével. A fázis faktor valójában az (1.57) kifejezésben szereplő determináns gyökvonásakor keletkezik. A determináns a klasszikus pálya mentén több ponton végtelenné válhat. Ezek az ún. fókusz pontok. Elnevezésük onnan származik, hogy ha az  $x$  pontból sok pályát indítunk, melyek kezdeti sebessége némileg eltér annak a pályának a kezdeti sebességétől, amely  $t$  idő alatt  $x'$ -be érkezik, akkor ezek a pályák a fókusz pontokon refókuszálódnak. A  $\nu_j$  fázis ezen fókuszpontok száma. Ezeknek a fázisoknak a felfedezésében és értelmezésében Maslovnak úttörő szerepe volt [Maslov 1965], de eredményei csak később váltak széles körben ismertté [Maslov 1972].

## 1.2.2. A Green függvény

A klasszikus esethez hasonlóan az időfejlesztő operátor nyoma kifejezhető a sajátértékek segítségével:

$$\text{Tr}\mathcal{K}^t = \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}, \quad (1.58)$$

ahol az egyszerűség kedvéért diszkrét spektrumot tételeztünk fel. Kötött rendszer esetén az  $E_k$ -k valósak, és energiaszinteknek nevezzük őket, míg nyílt rendszerek esetén komplexek, imaginárius részük negatív és megegyeznek a rendszer szórási  $S$  mátrixának pólusaival. Az egyes energiák a nyom Fourier transzformáltjának pólushelyei lesznek:

$$\frac{1}{i\hbar} \int_0^{+\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} \text{Tr}\mathcal{K}^t = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{E - E_k + i\epsilon}, \quad (1.59)$$

ahol  $\epsilon \rightarrow +0$  egy kicsiny regularizáló faktor, ami az integrált elvégezhetővé teszi. A propagátor Fourier transzformáltja megegyezik a rendszer kifutó (avanzsált) Green függvényével:

$$G^+(x, x', E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{+\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} \mathcal{K}^t(x, x'), \quad (1.60)$$

mely kielégíti a stacionárius

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x^2 - U(x) + E \right) G^+(x, x', E) = \delta(x - x') \quad (1.61)$$

egyenletet.

A Green függvény szemiklasszikus alakját úgy nyerjük, ha az (1.60) egyenletben az időfejlesztő operátort annak a  $\hbar \rightarrow 0$  klasszikus határesetben érvényes (1.56) aszimptotikus alakjával helyettesítjük:

$$G_{sc}^+(x, x', E) = \sum_j \int_0^{+\infty} dt \frac{1}{(2\pi i\hbar)^{f/2}} \sqrt{|C_j(x, x', t)|} e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t + \frac{i}{\hbar}R_j(x, x', t) + i\pi\nu_j/2}, \quad (1.62)$$

és a benne szereplő tagokat, a konzisztenciát fenntartva, ismét a nyereg-pont módszerrel értékeljük ki. Az egyes tagok nyeregpontjai azok a pontok melyekre a fázis deriváltja eltűnik:

$$\frac{\partial}{\partial t}(R_j(x, x', t) + Et)|_{t=t^*} = \frac{\partial R_j(x, x', t^*)}{\partial t} + E = 0.$$

A fázis értéke a nyeregpontban  $S_j(x, x', E) = R_j(x, x', t^*(E)) + Et^*(E)$  lesz. Ez a függvény pedig nem más mint a klasszikus mechanikában szokásos rövidített vagy Hamilton-Jacobi hatás függvény,

$$S(x, x', E) = \int_x^{x'} pdq \quad (1.63)$$

a  $j$ -vel indexelt pálya mentén. A nyeregpont integrálban fellépő Gauss integrálokat elvégezve a Green függvényre a Van Vleck formulához hasonló

$$G_{sc}^+(x, x', E) = \frac{2\pi}{(2\pi i\hbar)^{(f+1)/2}} \sum_j \sqrt{|D_j(x, x', E)|} e^{\frac{i}{\hbar} S_j(x, x', E) + i\pi\mu_j/2} \quad (1.64)$$

kifejezés adódik, azonban benne az időtől függő hatás helyett az energia függő Hamilton-Jacobi hatás szerepel, beleértve a

$$D(x, x', E) = \left\| \begin{array}{cc} \frac{\partial^2 S(x, x', E)}{\partial x_i \partial x'_j} & \frac{\partial^2 S(x, x', E)}{\partial x_i \partial E} \\ \frac{\partial^2 S(x, x', E)}{\partial E \partial x'_j} & \frac{\partial^2 S(x, x', E)}{\partial E^2} \end{array} \right\| \quad (1.65)$$

determinánst is. A  $j$  index most az  $x$ -ből  $x'$ -be menő  $E$  energiával mozgó klasszikus pályákat jelöli. A  $\mu_j$  index pedig most az ilyen pályák fókusz pontjait számolja.

Hasonlóan ahhoz, ahogy az időfüggő esetben az időfejlesztő operátor alakját expliciten meg tudtuk adni rövid időkre (ld. (1.52)), most a Green függvény kis  $|x - x'|$  távolságokra érvényes alakja határozható meg:

$$G_0(x, x', E) = -\frac{im}{2\hbar^2} \left( \frac{\sqrt{2m(E - U(x))}}{2\pi\hbar|x - x'|} \right)^{\frac{f-2}{2}} H_{\frac{f-2}{2}}^+(\sqrt{2m(E - U(x))}|x - x'|/\hbar), \quad (1.66)$$

ahol  $H_\nu^+$  a (kifutó) Hankel függvényt jelöli.



### 1.2.3. A trace formula és a spektráldetermináns

A (1.64) Green függvény ismeretében az ún. *trace formulát* formálisan a Green függvény nyomának,

$$\int dx G^+(x, x, E) = \sum_k \frac{1}{E - E_k}, \quad (1.67)$$

a szemiklasszikus  $\hbar \rightarrow 0$  határesetben a nyeregpontról való kiértékelése után kapjuk. Azonban itt nagyobb gondosságra van szükség, mint ahogy azt a klasszikus eset alapján feltételezhetnénk. A probléma gyökere az, hogy az (1.67) szumma divergens. A divergencia jellegét megvilágíthatjuk úgy, hogy az (1.67) szummát integrál alakba írjuk:

$$\sum_k \frac{1}{E - E_k} = \int_0^\infty dE' \frac{d(E')}{E - E'}, \quad (1.68)$$

ahol  $d(E) = \sum_{k=0}^\infty \delta(E - E_k)$  a rendszer állapotsűrűsége. A szumma nagy energiás ( $E_k, E' \gg E$ ) tagjainak összege megbecsülhető egy  $\int dE' \frac{\bar{d}(E')}{E - E'}$  integrállal, ahol az átlagos állapotsűrűséget a statisztikus mechanikából jól ismert

$$\bar{d}(E) = \frac{1}{h^f} \int dx dp \delta(E - H(x, p)) = \frac{m 2^{1-f}}{h^f \pi^{f/2} \Gamma(f/2)} \int_{U(x) < E} dx [2m(E - U(x))]^{\frac{(f-2)}{2}} \quad (1.69)$$

kifejezés szolgáltatja. Nagy energiák esetén az állapotsűrűség viselkedése tipikusan  $\bar{d}(E) \sim E^{(f-2)/2}$ , és az (1.68) integrál a számunkra fontos  $f \geq 2$  esetben divergens. A trace divergenciáját megszüntethetjük, ha kivonjuk belőle az energiaszintek átlagos sűrűsége okozta divergenciát, és a

$$\text{Tr}g(E) = \lim_{E_{max} \rightarrow \infty} \left( \sum_{k, E_k < E_{max}} \frac{1}{E - E_k} - \int_0^{E_{max}} dE' \frac{\bar{d}(E')}{E - E'} \right) \quad (1.70)$$

különbséget vizsgáljuk. Ez a kifejezés már nem lesz divergens, és mivel az  $E$  energia egy sima függvényének levonása nem változtat a pólusok helyzetén, így ez az új regularizált trace is alkalmas marad az energiaszintek meghatározására. Egy másik hasznos tulajdonsága ennek a regularizációnak, hogy

az (1.66) rövid távolságokra kiszámított Green függvényt felhasználva, a következő alakba írható:

$$\text{Tr}g(E) = \text{Tr}(G^+ - G_0) = \int dx (G^+(x, x, E) - G_0(x, x, E)). \quad (1.71)$$

A nyeregpontról módszerrel célszerű ezek után ezt a regularizált alakot kiszámítani. A szemiklasszikus számolásnál természetesen a Green függvény helyére az (1.64) szemiklasszikus Green függvényt helyettesítjük:

$$\text{Tr}g_{sc}(E) = \frac{2\pi}{(2\pi i\hbar)^{\frac{f+1}{2}}} \int dx \sum_j |D_j(x, x, E)|^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} S_j(x, x, E) + i\pi\mu_j/2} - \int dx G_0(x, x, E). \quad (1.72)$$

A trace-ben fellépő  $j$  pályák most olyanok, hogy kezdő- és végpontjuk egyaránt  $x$ . A nyeregpontról ismét a fázis deriváltjának zérushelyei adják. A fázis most a Hamilton-Jacobi hatás. Deriváltjának kiszámításakor a kezdő- és a végpont szerint is deriválnunk kell,

$$0 = \frac{\partial S_j(x, x, E)}{\partial x} = \frac{\partial S_j(x', x'', E)}{\partial x'} \Big|_{x'=x''=x} + \frac{\partial S_j(x', x'', E)}{\partial x''} \Big|_{x'=x''=x} = p'_j(x) - p''_j(x), \quad (1.73)$$

ahol felhasználtuk, az impulzusok Hamilton-Jacobi féle

$$p' = \frac{\partial S(x', x'', E)}{\partial x'}, \quad p'' = -\frac{\partial S(x', x'', E)}{\partial x''}$$

definícióit. Az (1.73) egyenlet azt jelenti, hogy a  $j$ -vel jelölt klasszikus pályák nemcsak ugyanabban az  $x$  pontban kezdődnek és végződnek, de a pálya kezdő és vég impulzusai is megegyeznek. Ezt a feltételt kielégítik a 0 hosszúságú pályák, amik  $x$ -ből indulnak, és ott is végződnek ill. az  $x$ -en áthaladó klasszikus periodikus pályák. Megmutatható, hogy a 0 hosszúságú pályák járuléka pontosan megegyeznek a regularizáció érdekében bevezetett  $\int dx G_0(x, x, E)$  tag járulékaival, és így ezek kiejtik egymást. A periodikus pályák járulékaiknak kiszámításához ismét parallel és ortogonális koordinátákat kell bevezetni a pálya körüli kis tubusban. Az integrálokat csak hosszas manipulációk után lehet kiszámítani, aminek részletezése nélkül a végeredmény:

$$\text{Tr}g_{sc}(E) = \sum_p \frac{T_p}{i\hbar} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} r S_p(E) + i\pi\mu_p/2}}{|\det(\mathbf{1} - \mathbf{J}_p^r)|^{1/2}}, \quad (1.74)$$

ahol a jelölések megegyeznek a klasszikus esetével,  $\mu_p$  Maslov index a periodikus pálya menti fókusz pontok száma,  $S_p(E) = \oint pdq$  a periodikus pálya egyszeri körüljárására vett Hamilton-Jacobi hatás. A klasszikus trace formulától eltérően itt oszcilláló tagokból álló összeget kell kiszámítani. Figyelemre méltó a stabilitási faktorban megjelenő  $1/2$  hatvány. A klasszikus esetben az

$$\frac{1}{|\det(\mathbf{1} - \mathbf{J}_p^r)|}$$

faktor lényegében egy adott periodikus pálya körüli megtalálási valószínűséggel arányos. A kvantumos esetben ennek a gyöke jelenik meg, ami annak a jele, hogy kvantumosan a periodikus pályák megtalálási amplitúdói összegződnek.

A klasszikus esethez hasonlóan itt is kiszámítható a spektráldetermináns, az ún. Gutzwiller-Voros zeta függvény:

$$Z_{sc}(E) = \exp \left( - \sum_{p,r} \frac{1}{r} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} r S_p(E) + i r \mu_p / 2}}{|\det(\mathbf{1} - \mathbf{J}_p^r)|^{1/2}} \right), \quad (1.75)$$

melynek logaritmikus deriváltja éppen a a trace formulát adja:

$$\text{Tr} g_{sc}(E) = \frac{d}{dE} \log Z_{sc}(E) = \frac{Z'_{sc}(E)}{Z_{sc}(E)}, \quad (1.76)$$

és az (1.67) ill. (1.70) pólusait, azaz a sajátenergiákat ill. rezonanciákat a  $Z_{sc}(E)$  zérushelyei adják.

#### 1.2.4. Rezonanciák a három diszk rendszerben

A három diszk egy nyílt szóró rendszer. Kötött kvantum állapotokkal nem rendelkezik. Az ilyen rendszereket szórási amplitúdókkal jellemezhetjük. A szórást tanulmányozva találhatunk rezonancia állapotokat, mely a rezonanciához tartozó valós energiával és a rezonancia élettartamának reciprokával jellemezhető. Matematikailag a rezonancia állapotok a Schrödinger egyenlet olyan sajátállapotai, melyekhez tartozó hullámfüggvényekkel szemben azt a határfeltételt rójuk ki, hogy a szórócentrumtól távol csak kifutó gömbhullámokból álljanak, és ne legyen befutó hullám komponensük. A Schrödinger egyenlet ill. Hamilton operátor ilyen határfeltétel mellett nem hermitikus, spektruma pedig komplex számokból áll. A sajátértékek valós része ( $\text{Re} E_k$ ) a

rezonancia valós energiája, imaginárius része negatív, nagysága  $\Gamma_k = -\text{Im}E_k$  a rezonancia  $\tau_k$  élettartamának reciproka,  $\Gamma_k = 1/\tau_k$ . A rezonanciák – a zárt rendszerek energiaszintjeihez hasonlóan – fontos szerepet játszanak az ilyen rendszerek leírásában, és kiindulópontjai további elméleti és kísérleti vizsgálatoknak. A három diszk rezonanciák numerikusan nagy pontossággal meghatározhatók, és jól tesztelhetők rajtuk a szemiklasszikus közelítésben kapott eredmények.

A Gutzwiller-Voros zeta függvényből (1.75) ugyanazzal a módszerrel határozhatók meg a rezonanciák mint a klasszikus esetben. Először bevezetjük az új

$$Z_{sc}(E, z) = \exp \left( - \sum_{p,r} \frac{z^{rn_p} e^{\frac{i}{\hbar} r S_p(E) + ir\mu_p/2}}{r |\det(\mathbf{1} - \mathbf{J}_p)|^{1/2}} \right) \quad (1.77)$$

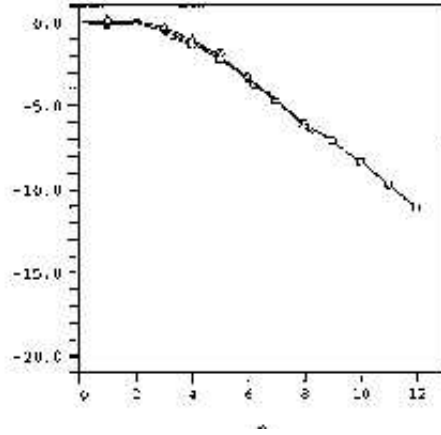
spektráldeterminánst. Ez  $z = 1$  esetén visszaadja az eredeti spektráldeterminánst. Előnye, hogy a spektráldeterminánst  $z$  szerint hatvány sorba fejtve azt a pattogási szám szerinti sor alakjában állíthatjuk elő. A  $z$  szerinti kifejtést a spektráldetermináns kummuláns sorfejtésének nevezzük:

$$Z_{sc}(E, z) = 1 - \sum_{k=1}^{\infty} Q_k(E) z^k, \quad (1.78)$$

ahol a  $Q_k(E)$  kummuláns csak a  $k$  vagy annál kevesebbet ütköző periodikus pályáktól függ. Amennyiben a kummulánsok elegendően gyorsan csökkennek, a sort egy kellően nagy  $k_{max}$  tagjánál megállhatunk, és  $z = 1$ -et visszahelyettesítve a zérushelyeket a

$$0 = 1 - \sum_{k=1}^{k_{max}} Q_k(E) \quad (1.79)$$

egyenletből határozhatjuk meg. Tapasztalatok szerint a kummuláns sor konvergenciája a kvantumos esetben is gyors, ám erre az esetre nem ismert olyan tétel, ami a szuper-exponenciális konvergenciát biztosítaná. Az (1.6) ábra a kummulánsok esését mutatja a három diszk rendszerre. A három diszk probléma és általában minden biliárd probléma esetén, a pattogó golyó sebességének és impulzusának nagysága a mozgás során állandó, és így a hatás  $S_p(E) = |p|L_p$  alakban írható, ahol  $L_p$  a pálya geometriai hossza  $|p|$  pedig az impulzus nagysága. Bevezetve a  $k = |p|/\hbar = \sqrt{2mE}/\hbar$  hullámszámot a spektráldetermináns a klasszikus (1.44) -hoz nagyon hasonló alakba

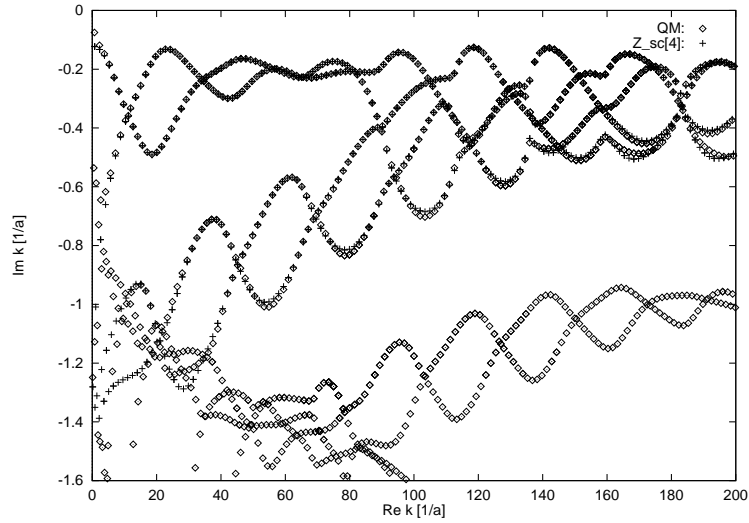


1.6. ábra: A három diszk rendszer szemiklasszikus kummulánsai  $a : R = 1 : 3$  esetén ( $\log_{10} |Q_k(E)|$  vs.  $k$ ). Nagy  $k$ -k esetén a kummulánsok már csak exponenciálisan esnek [Cvitanović, Rosenqvist, Vattay, Rugh 1993].

írható:

$$Z_{sc}(E, z) = \exp \left( - \sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{z^{rn_p}}{r} \frac{(-1)^{n_p r} e^{ikrL_p}}{|\Lambda_p^r|^{1/2} \left(1 - \frac{1}{\Lambda_p^r}\right)} \right). \quad (1.80)$$

Az egyes pályákra vonatkozó adatok az 1.1. táblázatból meghatározhatók ( $L_p$  ugyanaz mint  $T_p$ , mivel  $v = 1$  sebességet feltételeztünk). A Maslov indexek is különösen egyszerű alakúak a három diszk rendszerben. A kemény falakon való ütközés esetén a Maslov index éppen a pattogások számának kétszerese  $\mu_p = 2n_p, e^{i\mu_p\pi/2} = (-1)^{n_p}$ . Az 1.7. ábra a spektráldetermináns zérushe-lyeit mutatja. A valódi és szemiklasszikusan számolt rezonanciák jó egyezést mutatnak, ha a komplex hullámszám imaginárius része nem túl negatív. Az eltérések gyorsan csökkennek a hullámszám valós részének növelésével, ami természetes is, hiszen a  $k \rightarrow \infty$  határérték ugyanaz, mint a  $\hbar \rightarrow 0$  szemiklasszikus határérték. Egyre nagyobb energiák esetén a szemiklasszikus közelítés feltételei egyre jobban teljesülnek.

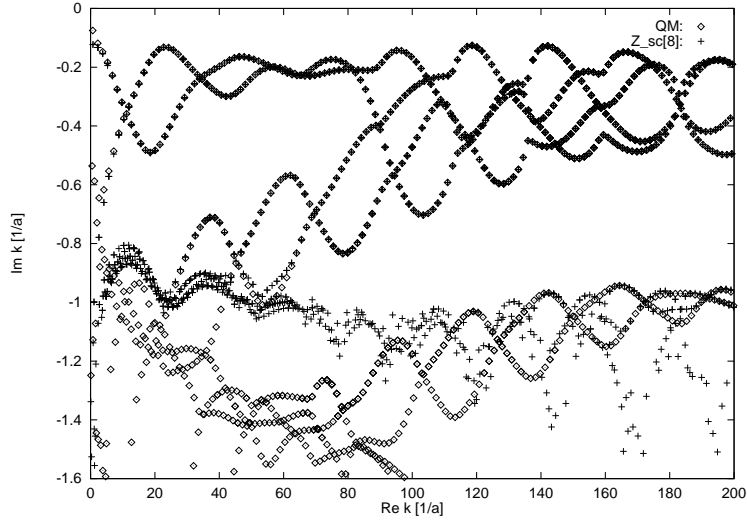


1.7. ábra: A három diszk rendszer egzakt ( $\diamond$ ) és szemiklasszikus (+) rezonanciái a komplex hullámszám ( $k$ ) síkon  $a : R = 1 : 6$ . A valós tengelyhez legközelebbi rezonanciák már az 5 legrövidebb primitív periodikus pályából ( $k_{max} = 4$ ) is kielégítően meghatározhatók (Az ábra mindkét esetben csak az A szimmetria osztályba tartozó rezonanciákat mutatja.) [Cvitanović, Vattay, Wirzba 1997].

### 1.3. A trace formula korrekciói

Amint már utaltunk rá, a Gutzwiller trace formula mérföldkő a klasszikusan kaotikus rendszerek szemiklasszikus kvantálásában. A 90-es évek elejéig több tucat rendszer esetén alkalmazták sikeresen az energiaszintek ill. rezonanciák meghatározására. Az esetek többségében a szemiklasszikus közelítés jól reprodukálta az energiaszinteket, gyakran beleértve még az alapállapotot is. Azonban, a szemiklasszikus közelítés hibáinak nagyságát a szemiklasszikus elméleten belül maradván nem tudjuk csökkenteni.

Ez jól demonstrálható a három diszk probléma esetén. Az 1.7. ábra a kvantum és a szemiklasszikus rezonanciákat mutatja akkor, amikor csak a maximum 4 ütközés után záródó periodikus pályákat vesszük figyelembe a szemiklasszikus számításoknál. Az 1.8. ábra ugyanezt mutatja a 8 ütközés után záródó pályák felhasználásával. Több periodikus pálya figyelembevételével újabb, mélyebben fekvő kvantum rezonanciákhoz is találunk közelítő



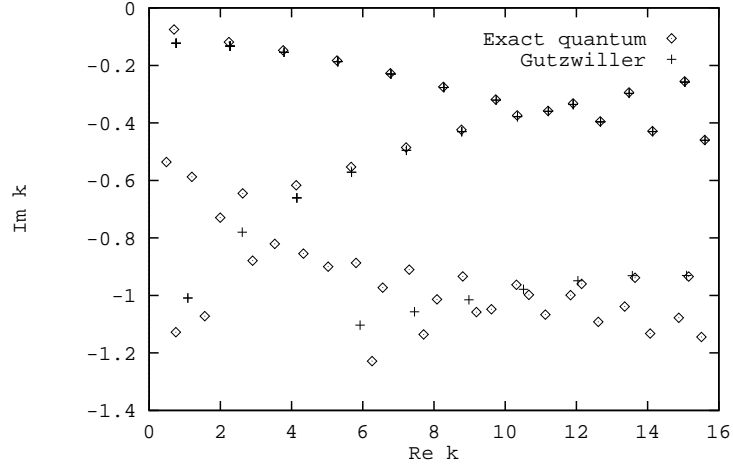
1.8. ábra: A három diszk rendszer egzakt ( $\diamond$ ) és szemiklasszikus (+) rezonanciái a komplex hullámszám ( $k$ ) síkon  $a : R = 1 : 6$ . A számításokhoz a maximum 8 ütközést végző primitív periodikus pályákat használtuk fel (Az ábra mindkét esetben csak az A1 szimmetria osztályba tartozó rezonanciákat mutatja.) [Cvitanović, Vattay, Wirzba 1997].

értékeket, de a korábban már megtalált rezonanciák pontossága lényegesen nem javul.

Ennek következtében a szemiklasszikus közelítés kvantumos korrekciói kaotikus rendszerekben a kilencvenes évek elejétől kezdve az érdeklődés közepontjába kerültek. Akkoriban az a vélemény terjedt el, hogy a szemiklasszikus közelítés elsődleges hibája abból származik, hogy a Gutzwiller trace formula levezetésekor fellépő nyeregpontról integrálokat csak a nyeregpontról közelítés vezető rendjében végezzük el. A Feynman út integrál nyeregpontról közelítésének korrekciói jól ismertek a térelméletből [Zinn-Justin 1989], a korrekciókat perturbatív módszerekkel  $(i\hbar)^n$  hatványok szerinti aszimptotikus sor alakjában kapjuk meg. Amennyiben a trace formulát ilyen korrigált Feynman propagátorból származtatjuk, a korrigált trace formula

$$\text{Tr}g(E) = \sum_l \frac{e^{iS_l/\hbar}}{\hbar} \left( A_l^{(0)} + i\hbar A_l^{(1)} + (i\hbar)^2 A_l^{(2)} + \dots \right) \quad (1.81)$$

alakú lesz, ahol  $l$  a periodikus pályákra vett összegzés. Az  $A_l^{(0)}$  vezető rendű



1.9. ábra: A három diszk rezonanciák a kis  $\text{Re } k$  tartományban. Az egzakt kvantum rezonanciák ( $\diamond$ ) egy részéhez még közelítőleg sem találunk megfelelő szemiklasszikus (+) rezonanciát ([Rosenqvist, Vattay, Wirzba 1996] alapján).

tag azonos az (1.75) formulával. Az első korrekció Feynman diagramm-jait Gaspard és Alonso [Gaspard, Alonso 1993] határozta meg, és alkalmazta a három diszk rendszerre. Az első  $\hbar$  korrekcióval kiszámított rezonanciák hibája százalékosan kifejezve jelentősen csökkent a nagy reális résszel rendelkező, és a valós tengelyhez is közel fekvő rezonanciák esetén. A kis reális résszel rendelkező rezonanciák esetén a helyzet nem javult, sőt a legalacsonyabb rezonanciára romlik (ld. az 5.1. táblázatot).

Ennek oka az, hogy az (1.81) sorfejtés aszimptotikus, a sor esszenciálisan divergens, melynek magas rendű tagjai  $A_l^{(n)} \sim n!a^n$  módon viselkednek [Dingle 1973]. Ezért az aszimptotikus sorok elméletében megszokott módon [Erdélyi 1953] az ilyen sorokat csak egy bizonyos optimális tagig szabad összegezni, amíg pontosságuk javul. Az optimális tag után a sor gyorsan divergál. A kis reális részű rezonanciáknál ez az optimális tag éppen az első, minden további tag rontja az eredményt.

Összességében azt mondhatjuk, hogy a nyeregpont korrekciók jó eredményeket hoztak a valós tengelyhez közeli és viszonylag nagy reális résszel rendelkező rezonanciák esetén. Azonban a kis reális résszel rendelkező és nagy



negatív imaginárius résszel rendelkező rezonanciák esetén egy egészen új jelenséggel találkozunk. Az 1.9. ábrán kinagyított tartományon jól látható, hogy bizonyos rezonanciákhoz egyáltalán nem is található szemiklasszikus közelítés. Ezen a problémán a perturbatív jellegű nyeregponthoz korrekciók nyilvánvalóan nem tudnak segíteni. A hiányzó rezonanciák rávilágítottak arra, hogy a szemiklasszikus közelítés Gutzwiller elmélete még valami nagyon alapvető effektust nem tartalmaz, ami bizonyos szempontból a nyeregponthoz korrekciónál is fontosabb. A megoldást a [Vattay, Wirzba, Rosenqvist 1994] publikációban találtuk meg, melyben megmutattuk, hogy ez a fontos effektus a diffrakció. A következő fejezetben a Gutzwiller trace formula diffrakciós effektusokat is figyelembevevő általánosításait mutatjuk be.



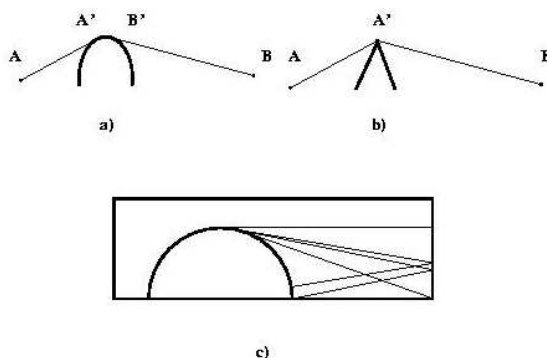
## 2. Fejezet

# A diffrakció periodikus pálya elmélete

A Gutzwiller trace formula a kvantummechanika egy geometriai optikai jellegű közelítésén alapul. Ez a közelítés mindaddig nagyon pontos, amíg a periodikus pályák elegendően jól lefedik a kaotikus rendszer fázissterét. Ez azonban nem áll fenn, ha például a szóró centrumok száma kicsi vagy távolságuk nagy a tipikus méretükhöz képest. Ilyen esetekben fontos figyelembe venni a geometriai optikán túli effektusokat is. Ebben a fejezetben [Vattay, Wirzba, Rosenqvist 1994], [Vattay, Wirzba, Rosenqvist 1995], [Rosenqvist, Vattay, Wirzba 1996] és [Dahlqvist, Vattay 1998] alapján azt vizsgáljuk meg, hogy a diffrakció geometriai elmélete hogyan építhető be a periodikus pálya elmélet keretei közé. Diffrakció akkor történik, ha a részecske de Broigle hullámhossza nagyon nagy a szóró potenciál térbeli változásához képest. Ilyen hely például a szórócentrumok határa, kiszögellései, sarkai, valamint kis pontszerű szennyezések. A diffrakciós effektusok fontos szerepet játszanak a mezoszkopikus vezetők fizikájában is, melyről később még lesz szó.

### 2.1. A diffrakció geometriai elmélete

A diffrakciós járulékok levezetéséhez kiindulhatunk a Feynman pálya integrálból is. A szemiklasszikus Van Vleck propagátor levezetésekor a nyeregponthoz közelítést alkalmaztuk. A hatás függvény minimumait kerestük és így jutottunk el az  $x$  és  $x'$  pontokat összekötő klasszikus pályákhoz. Azonban nem minden esetben lehetséges két pontot klasszikus pályával összekötni. A 2.1



2.1. ábra: **a**, és **b**,: Két pontot összekötő legrövidebb pályák kemény (átlátszatlan) potenciál falak jelenlétében. **c**,: A legrövidebb diffraktív pályák a két diszk rendszerben.

a, és b, ábrákon két ilyen helyzet látható. Az egyikben az A és B pontokat egy sima felületű akadály választja el egymástól, a másikban pedig egy éles sarokkal rendelkező objektum. Az első esetben a legrövidebb pálya a sima felületet érintve a sima felületen halad, majd attól érintőleges irányban elszakadva éri el a végpontját. A második esetben a legrövidebb pálya az objektum sarokpontján keresztül jut el a végponthoz. Ezek a pályák nem stacionáriusak abban az értelemben, hogy a hatás variációja nem tűnik el mellettük. De mégis ezek azok a pályák, melyek körül a kényszerfeltételeket is figyelembevéve a hatás változása a legkisebb. Így a Feynman pálya összegzés során ezek járuléka a domináns. A Feynman pálya integrálból ezeket a diffrakciós járulékokat Buslaev [Buslaev 1963] vezette le.

A diffrakció geometriai elméletét más úton J. B. Keller dolgozta ki [Keller 1958] és [Keller 1962] cikkeiben. Ennek lényegét most összefoglaljuk. Két pontot összekötő diffraktív pályákat átlátszatlan potenciálfalak jelenlétében Fermat variációs elvének kiterjesztése útján kaphatjuk meg [Keller 1962]. A szokásos Fermat elv szerint a konfigurációs térben a klasszikus pályák azok a sima görbék, melyekre egy A és B pont közötti  $\int pdq$  hatás stacionárius. Kemény falak jelenlétében újfajta sima görbéket is meg kell engednünk: figyelembe kell vennünk minden olyan számhármashoz ( $r, s, t \geq 0$ ) tartozó görbéket ( $D_{rst}$ ), melyek  $r$  a felszínen futó sima görbét,  $s$  csúcst és  $t$  élet tartalmaznak (3 dimenziós feladatot feltételezve). A diffrakciós pályák azok,

melyek egy-egy  $D_{rst}$  osztályon belül minimalizálják a hatást. A  $D_{000}$  osztály a szokásos pályákat jelöli. Kétdimenzióban csak a  $D_{r0s}$  osztályok lehetségesek. Ezek  $D_{100}$  és  $D_{001}$  reprezentánsai a 2.1 a, és b, ábrákon láthatók.

Felmerülhet bennünk az a gondolat, hogy vajon tekinthetjük-e valamilyen értelemben klasszikus pályáknak, a Newton egyenlet megoldásainak, ezeket a diffraktív pályákat. Képzeljük el, hogy az  $A$  pontból minden irányban klasszikus pályákat indítunk el. Ezek egy része nem fog az akadállyal találkozni. Más részük az akadályon ütközik, és arról lepattan. E kétfajta viselkedés határesetek az a diffraktív pálya, ami éppen az  $A'$  pontot találja el. Ennek a pályának a kiszámítására a Newton egyenlet nem ad eligazítást, megoldása nem egyértelmű. A diffraktív pályákat felfoghatjuk úgy is, hogy azokban a pontokban, ahol a klasszikus mozgásegyenletek nem oldhatók meg egyértelműen, megengedjük, hogy a pálya tetszőleges irányban folytatódjon. Ezeknek az irányoknak persze a valószínűsége irányfüggő lesz, és csak a kvantummechanikából tudjuk meghatározni. Ennek módját ismertetjük most.

Amint megtaláltuk az általánosított diffraktív pályát, a pálya egyes szakaszait követve ki tudjuk számítani a szemiklasszikus Green függvényt a Keller által megadott módszerrel. Például a 2.1 b ábra ( $D_{001}$ ) típusú pályája esetén az  $A$  és az  $A'$  sarokpont között a szemiklasszikus Green függvényt (1.64) adja meg. A Green függvény felfogható úgy is, mint az  $A$ -ból mint forrásból induló hullámok  $A'$ -be beeső amplitúdója

$$G_{\text{inci}} = G_{sc}^+(x_A, x_{A'}, E). \quad (2.1)$$

Amint az  $A$ -ból induló hullámfront eléri az  $A'$  sarokpontot, ott a Hygens elvnek megfelelően maga is forrása lesz újabb hullámoknak. A sarokpontban eredő forrás erősség arányos lesz a beeső hullám amplitúdójával:

$$Q_{\text{diff}} = \mathcal{D}G_{\text{inci}}. \quad (2.2)$$

Az arányossági tényező a diffrakciós állandó  $D$ , amely a lokális geometriától és a diffrakció fajtájától függ. A diffrakciós állandó meghatározható egzaktul megoldható problémák [Sommerfeld 1896, Pauli 1938] Green függvényeinek szemiklasszikus sorfejtéséből. A sarok (vagy ék) diffrakció esetén ez:

$$\mathcal{D}(\phi_{in}, \phi_{out}) = \frac{\sin(\pi/n)}{n} \left[ \frac{1}{\cos(\pi/n) - \cos((\phi_{in} - \phi_{out})/n)} - \frac{1}{\cos(\pi/n) - \cos((\pi + \phi_{in} + \phi_{out})/n)} \right], \quad (2.3)$$

ahol  $(2 - n)\pi$  az ék nyílásszöge,  $\phi_{in}$  és  $\phi_{out}$  pedig a diffraktív pályának az ék normálisához viszonyított befutási és kifutási szögei. Végül, a Green függvény a B pontban a  $Q_{diff}$  forrásereőségű forrásból induló hullám erőssége lesz, amit  $Q_{diff}G_{sc}^+(x_{A'}, x_B, E)$  ad meg. Összefoglalva az A-ból B-be vezető diffraktív pálya mentén számított Green függvény

$$G_D(x_A, x_B, E) = G_{sc}^+(x_A, x_{A'}, E)\mathcal{D}(\phi_{in}, \phi_{out}, k)G_{sc}^+(x_{A'}, x_B, E) \quad (2.4)$$

alakú lesz.

A 2.1a, ábrán látható szituáció az ismertetett ék diffrakciónál annyival bonyolultabb, hogy a diffraktív pálya egy szakaszon az akadály felszínén halad. Ismét követve a diffrakciós pályát az A és A' pontok között, a Green függvényt az (1.64) adja. Az A' pontban a beeső hullám egy felszínen végighaladó ún. "kúszó" (creeping) hullámot indít. Az A' pontban a diffrakciós állandó a normál-kúszó hullám konverzióra vonatkozólag [Franz 1954]

$$\mathcal{D} = 2^{1/3}3^{-2/3}\pi e^{5i\pi/12} \frac{(k\rho)^{1/6}}{Ai'(x_1)}, \quad (2.5)$$

ahol  $Ai'(x)$  az Airy integrál deriváltja,  $Ai(x) = \int_0^\infty dt \cos(xt - t^3)$ ,  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  a hullámszám,  $\rho$  a felszín görbületi sugara a csúszó hullám keletkezési pontjában,  $x_1$  az Airy integrál első zérushelye, ami jó közelítéssel  $x_1 = 6^{1/3}(\pi(9/4))^{2/3}/2$ . A forrás ezután egy kúszó hullámot kreál a felszín mentén. A kúszás közben a hullám amplitúdója gyengül, s ennek mechanizmusa analóg az elektrodinamikában szokásos sugárzás mechanizmusával. A kisugárzott intenzitás arányos a forrás intenzitásával,

$$\frac{d}{ds}G_{cr}^+(s, E)^2 = -2\alpha(s, E)G_{cr}^+(s, E)^2, \quad (2.6)$$

ahol  $s$  a felszín mentén a forrástól mért távolság  $G_{cr}^+(s, E)$  a Green függvény komplex amplitúdója a felszínen. Az  $\alpha(s, E)$  együttható függ a felszín helyi görbületi sugarától ( $\rho(s)$ ), és  $\alpha(s, E) = x_1 e^{-i\pi/6}(k/6\rho(s)^2)^{1/3}$  alakú [Schrempp, Schrempp 1980]. A csúszó hullám Green függvénye végül

$$G_{cr}^+(q_{A'}, q_{B'}, E) = e^{-\int_0^L ds\alpha(s, E)} e^{\frac{i}{\hbar}S(x_{A'}, x_{B'}, E)}, \quad (2.7)$$

ahol  $L$  a csúszó hullám által a felszínen megtett út, és  $S(x_{A'}, x_{B'}, E)$  ugyanezen szakasz mentén vett hatás integrál. A csúszó hullám aztán a B' pontban ismét tisztán szabadon haladó hullámot indít. A hullám forrása B'-ben van

és erősségét ismét a (2.2) és (2.5) egyenletek adják meg. Végül a diffraktív pálya mentén számított teljes Green függvény a

$$G_D^+(x_A, x_B, E) = G(x_A, x_{A'}, E) \mathcal{D}_{A'} G^D(x_{A'}, x_{B'}, E) \mathcal{D}_{B'} G(x_{B'}, x_B, E) \quad (2.8)$$

alakot ölti.

Összefoglalva az eddigi formulákat, azt mondhatjuk, hogy a szemiklasszikus Green függvény diffraktív része ( $G_D(q, q', E)$ ) leírja a klasszikus dinamika szinguláris pontjaiból származó járulékokat. Ezeket a járulékokat a legáltalánosabban a

$$G_D^+(x, x') = \sum_{k=1}^N \sum_{j_1, j_2, \dots, j_k} G_{sc/cr}^+(x, x_{j_1}) \mathcal{D}_{j_1} G_{sc/cr}^+(x_{j_1}, x_{j_2}) \mathcal{D}_{j_2} \dots \mathcal{D}_{j_N} G_{sc/cr}^+(x_{j_k}, x') \quad (2.9)$$

módon foglalhatjuk össze, ahol  $x_j, j = 1, 2, \dots, N$  a diffraktív pontok helyei,  $k$  pedig a diffraktív pontok száma. A diffraktív pontok között a hullámterjedés normál ( $sc$ ) vagy ( $cr$ ) kúszó jellegének megfelelően használjuk a (2.7) vagy az (1.64) Green függvényeket.

## 2.2. A diffraktív trace formula

A diffraktív Green függvény levezetése után a diffraktív pályák járuléka a trace formulába már kiszámítható. A teljes szemiklasszikus Green függvény most a diffraktív (2.9) és geometriai (1.64) pályákat tartalmazó tagok összege, és a trace is két tagból áll:

$$\text{Tr } G^+(E) \approx \text{Tr } G_{sc}^+(E) + \text{Tr } G_D^+(E), \quad (2.10)$$

ahol  $\text{Tr } G_{sc}^+(E)$  a szokásos Gutzwiller trace formula, míg  $\text{Tr } G_D^+(E)$  az új trace formula, ami a diffraktív járulékokat tartalmazza. A diffraktív trace formulát a (2.9) kifejezés  $x$  és  $x'$  változóinak egybeejtése és kiintegrálása után kapjuk:

$$\text{Tr } G_D^+ = \sum_k \sum_{j_1, j_k} \int dx G_{sc/cr}^+(x_{j_k}, x) G_{sc/cr}^+(x, x_{j_1}) \prod_{i=2}^{k-1} \mathcal{D}_{j_i} G_{sc/cr}^+(x_{j_i}, x_{j_{i+1}}), \quad (2.11)$$

ahol különválasztottuk a fix és az  $x$  függő tagokat. A fellépő integrál a nyereg-pont módszer segítségével kiszámítható [Vattay, Wirzba, Rosenqvist 1994],

eredménye

$$\int dx G_{sc/cr}^+(x_{j_k}, x) G_{sc/cr}^+(x, x_{j_1}) \approx \frac{T(x_{j_k}, x_{j_1})}{i\hbar} G_{sc/cr}^+(x_{j_k}, x_{j_1}), \quad (2.12)$$

ahol  $T(x_{j_k}, x_{j_1})$  a két diffraktív pontot összekötő klasszikus vagy kúszó pálya ideje. Ezt az összefüggést visszahelyettesítve, a szummálandó tagok mindegyike diffraktív pontokat klasszikus vagy kúszó pályákkal összekötő zárt periodikus pálya lesz.

Ennek a kifejezésnek az újdonsága az, hogy benne nem a hagyományos – a Newtoni mechanikát kielégítő – periodikus pályák lépnek fel, hanem olyan ún. *diffraktív periodikus pályák* melyek a diffraktív pontokat kötik össze a diffrakció geometriai elméletének szabályai szerint, periodikus pályát formálva.

Végül, a trace a következő különösen egyszerű alakra [Vattay, Wirzba, Rosenqvist 1994] redukálódik:

$$\text{Tr } G_D(E) = \sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{T_p(E)}{i\hbar} \left[ \prod_{i=1}^{n_p} \mathcal{D}(x_i) G_{sc/cr}^+(x_i, x_{i+1}, E) \right]^r, \quad (2.13)$$

ahol  $T_p(E)$  a diffraktív primitív (egyszeresen bejárt) periodikus pálya periódus ideje,  $x_i$  a diffraktív pontok helye,  $\mathcal{D}(x_i)$  a diffrakciós állandó a primitív pálya mentén,  $n_p$  a diffraktív pontok száma a pályán és  $x_{n_p+1} = x_1$ .

### 2.3. A diffraktív spektráldetermináns

Ebben a fejezetben a sajátenergiák vagy rezonanciák megkereséséhez szükséges a spektráldetermináns levezetését adjuk meg. A spektráldetermináns logaritmikus deriváltja a trace formula:

$$\text{Tr } G(E) = \frac{d}{dE} \log Z(E) = \frac{Z'(E)}{Z(E)}, \quad (2.14)$$

és zérói ( $Z(E) = 0$ ) megegyeznek a trace pólusaival, amik éppen a sajátenergiák vagy rezonanciák. Mivel a trace formula most a Gutzwiller és a diffraktív tag összege, a spektráldetermináns a Gutzwiller-Voros féle (1.75) és egy új diffraktív zeta függvény szorzata ( $Z(E) = Z_{sc}(E)Z_D(E)$ ), mivel ekkor a logaritmikus derivált összeg alakban áll elő:

$$\frac{d}{dE} \log Z(E) = \frac{d}{dE} \log Z_{sc}(E)Z_D(E) = \frac{Z'_{sc}(E)}{Z_{sc}(E)} + \frac{Z'_D(E)}{Z_D(E)}, \quad (2.15)$$



és a diffraktív résznek ki kell elégítenie a

$$\text{Tr}G_D^+ = \frac{d}{dE} \log Z_D(E) \quad (2.16)$$

egyenletet. Könnyen ellenőrizhető, hogy  $\hbar$  vezető rendjében ez a spektráldetermináns

$$Z_D(E) = \exp \left( - \sum_{p,r=1}^{\infty} \frac{1}{r} \prod_{i=1}^{n_p} [D(q_i^p) G(q_i^p, q_{i+1}^p, E)]^r \right) \quad (2.17)$$

alakú. A repetíciós számra az összegzés elvégezhető, és az  $1-x = \exp(-\sum_{r=1}^{\infty} \frac{x^r}{r})$  azonosságot kihasználva

$$Z_D(E) = \prod_p (1 - t_p) \quad (2.18)$$

végtelen produktum alakra hozható, ahol bevezettük a

$$t_p = \prod_{i=1}^{n_p} \mathcal{D}(x_i^p) G(x_i^p, x_{i+1}^p, E), \quad (2.19)$$

súlyokat, ahol  $x_i^p$  a  $p$  primitív diffraktív ciklus diffraktív pontjait jelöli.

A (2.18) spektráldeterminánsban a végtelen szorzat kifejthető a következő alakban

$$Z_D(E) = 1 - \sum_p t_p + \sum_{p,p'} t_p t_{p'} - \dots \quad (2.20)$$

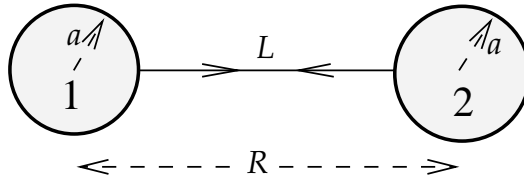
A (2.19) súlyoknak van egy olyan tulajdonsága, ami segít radikálisan csökkenteni a kiszámítandó tagok számát: Ha két különböző  $p$  és  $p'$  diffraktív periodikus pályának van legalább egy közös szakasza, akkor a két pályából egy hosszabb harmadik  $p + p'$  periodikus pályát képezhetünk, és az ehhez a pályához tartozó súly éppen a két rövidebb periodikus pálya súlyának szorzata lesz:

$$t_{p+p'} = t_p \cdot t_{p'}. \quad (2.21)$$

A (2.20) kifejtésben fellép ez az összetett pálya is de negatív előjellel. Így az ilyen primitív periodikus pályák szorzatai kiesnek, és csak azok az alapvető diffraktív primitív periodikus pályák maradnak meg, melyek nem állnak elő rövidebb pályák egyesítéseiként:

$$Z_D(E) = \prod_p (1 - t_p) = 1 - \sum_b t_b, \quad (2.22)$$

ahol a  $t_b$ -k az *alap* pályák.



2.2. ábra: A két diszk rendszer

## 2.4. Két diszk rezonanciák

A diffraktív periodikus pályák hatását először a három diszknél egyszerűbb két diszk rendszeren (ld. 2.2. ábra) teszteljük. A két diszk rendszer szimmetriáit kihasználva a 2.1.c, ábrán látható módon deszimmetrizálhatjuk a rendszert, a szimmetriatengelyeken történő ütközéseket beiktatva. A két diszk rendszerben egyetlen klasszikus periodikus pálya létezik, mely a két diszk közötti szimmetria tengelyen pattog oda-vissza. A szemiklasszikus spektráldetermináns egy periodikus pálya esetén rendkívül egyszerű alakra hozható:

$$Z_{sc}(k) = \exp \left( - \sum_{r=1}^{\infty} \frac{z^{rn_p}}{r} \frac{(-1)^{n_{pr}} e^{ikrL_p}}{|\Lambda_p^r|^{1/2} \left(1 - \frac{1}{\Lambda_p^r}\right)} \right) = \prod_{j=0}^{\infty} \left( 1 + \frac{e^{ikL_p}}{\Lambda_p^{(j+1/2)}} \right), \quad (2.23)$$

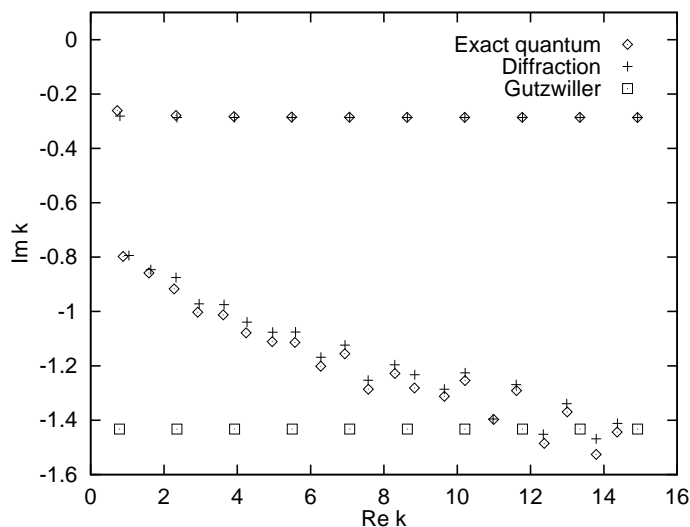
ahol  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ , és  $2m = \hbar = 1$ . Ennek a végtelen produktumnak a zérushelyei megegyeznek az egyes tagok zérushelyeivel, amit explicit formában meg is adhatunk:

$$k_{n,j}^{\text{res}} = (\pi n - i(j + 1/2) \ln \Lambda_p) / L_p, \quad (2.24)$$

ahol  $n = 1, 2, 3, \dots$ . A Gutzwiller trace formulára épülő szemiklasszikus közelítés ezt az eredményt adja. A 2.3. ábrán jól látható, hogy ezek a rezonanciák jó közelítéssel megadják a valós tengelyhez legközelebb fekvő rezonanciákat, de egyáltalán nem adnak közelítő értéket néhány mélyebben fekvő rezonanciára.

### 2.4.1. A szemiklasszikus Green függvény kiszámítása

A négy legrövidebb diffraktív pályát a fundamentális tartományban a 2.1.c, ábra mutatja. A diffraktív pályák járulékainak kiszámításához először a szabad pálya szakaszokra kell meghatározni a szemiklasszikus Green függvényt.



2.3. ábra: A két diszk rendszer rezonanciái  $a : R = 1 : 6$  esetén a komplex  $k$  térben. Csak azokat a rezonanciákat tüntettük fel, melyek hullámfüggvénye mindkét szimmetria tengelyre szimmetrikus. A  $(\diamond)$  jelöli az egzakt kvantum rezonanciákat [Wirzba 1992],  $(+)$  jelöli a diffraktív periodikus pályákkal kiegészített szemiklasszikus közelítést. A kis négyzetek jelölik a diffraktív pályák nélküli, pusztán a Gutzwiller trace formulából származó eredményt. Jól látható, hogy a diffraktív pályák nélkül a rezonanciák egy részéhez nem kapunk szemiklasszikus közelítést [Vattay, Wirzba, Rosenqvist 1994].

Kétdimenziós kemény falakkal határolt ún biliárd rendszerekben a Schrödinger egyenlet a Helmholtz egyenletre vezet,

$$(\Delta + k^2)\psi(x) = 0, \quad (2.25)$$

ahol a  $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$  a hullámszám. A hullámfüggvény a falakon eltűnik. A Helmholtz egyenlethez tartozó Green függvény a

$$(\Delta + k^2)G(x, x', E) = \delta(x - x') \quad (2.26)$$

egyenlet megoldása, ahol  $G(x, x', E)$  eltűnik a falakon. Falak hiányában kétdimenzióban a kifutó Green függvény

$$G^+(x, x', E) = -\frac{i}{4}H_0^{(1)}(kd(x, x')) \quad (2.27)$$

alakú, ahol  $H_0^{(1)}(x)$  az elsőfajú Hankel függvény, és  $d(x, x')$  a  $q$  és  $q'$  távolsága. Ennek a szemiklasszikus ( $\hbar \rightarrow 0$ ) közelítése meghatározható a Hankel függvény nagy argumentum esetén érvényes aszimptotikus alakjából:

$$G^+(x, x', E) = \frac{1}{\sqrt{8\pi kd(x, x')}} e^{ikd(x, x') - i3\pi/4}. \quad (2.28)$$

Ennek egy nagyon hasznos optikai interpretációját adhatjuk meg, ha követjük az  $x$  és  $x'$  pontokat összekötő sugarakat. A Green függvény fázisa a sugár mentén számított klasszikus hatás:

$$\int_q^{q'} p(q'') dq'' = kd(q, q').$$

A Green függvény amplitúdója pedig az

$$I(r) = \frac{1}{8\pi kr} \quad (2.29)$$

intenzitás négyzetgyöke, ami egy  $x$ -be helyezett pontszerű sugárzó forrás intenzitása a forrástól  $r = d(q, q')$  távolságra. Falak jelenlétében általában több mint egy  $x$ -ből induló sugár érheti el az  $x'$  végpontot. A szemiklasszikus Green függvény ezekre a sugarakra vett sugár menti Green függvények összege:

$$G_{sc}(q, q', E) = \sum_{\forall r x \rightarrow x'} G_0^r(x, x', E). \quad (2.30)$$

A  $G_0^r$  Green függvény fázisát a klasszikus hatás és a Maslov index összege adja. A Green függvény amplitúdója nem más, mint a négyzetgyöke annak az intenzitásnak aminek forrása  $x$ -ben van, és a sugár mentén jut el  $x'$ -be. Optikai analógiát használva úgy képzelhetjük, hogy az  $x'$  végpontban az  $x$ -beli forrásnak a falak, mint görbült tükrök által adott tükörképét látjuk. Az intenzitást ugyanaz a (2.29) formula adja ilyenkor is meg, de most az  $x$ -ből induló hullámfrontok effektív sugarát kell használnunk. Ha a falak nem görbültek, akkor ez az effektív sugár egyszerűen az  $x$  és  $x'$  között a sugár mentén mért  $d_r(x, x')$  távolság. Ilyenkor a Green függvény egyszerűen

$$G_0^r(q, q', E) = \frac{(-1)^{n_r}}{\sqrt{8\pi kd_r(q, q')}} e^{ikd_r(q, q') - i3\pi/4}, \quad (2.31)$$

ahol  $n_r$  az ütközések száma a sugár mentén. Görbült falak esetén az effektív sugarat az első ütközésig megtett  $l_1$  távolság és a  $\Lambda$  nyújtási faktor szorzata adja meg:

$$r_{eff} = l_1 \Lambda. \quad (2.32)$$

A nyújtási faktor nem más mint a geometriai optikából ismert görbe tükrök okozta nagyítás. Kiszámításának egy módja, hogy elkészítjük a tükrök egymás utáni nagyításainak

$$\Lambda = \prod_{i=1}^{n-1} (1 + \kappa_i^+ l_i), \quad (2.33)$$

szorzatát, ahol  $l_i$  az  $i$ . és az  $(i + 1)$ . ütközések közti távolság és  $\kappa$  a Bunimovich-Sinai [Bunimovich, Sinai 1980] görbület. A Bunimovich-Sinai görbületet pedig rekurzívan a

$$\begin{aligned} \kappa_i^+ &= \kappa_i^- + 2/r_i \cos(\phi_i), \\ \kappa_{i+1}^- &= \kappa_i^+ / (1 + \kappa_i^+ l_i) \end{aligned} \quad (2.34)$$

egyenletek segítségével számíthatjuk, ahol  $r_i$  a fal görbületi sugara az ütközési pontban,  $\phi_i$  a normálishoz viszonyított beesési szög,  $\kappa^\pm$  pedig a BS görbület értéke közvetlenül az ütközés előtt ill. után. A rekurzió kezdeti feltétele  $\kappa_1^- = 1/l_1$ , ami az első ütközési ponthoz érkező hullámfront görbülete. Végül a Green függvény alakja a következő lesz:

$$G_0^r(q, q', E) = \frac{(-1)^{n_r}}{\sqrt{8\pi k l_1 \Lambda_r}} e^{ikd_r(q, q') - i3\pi/4}. \quad (2.35)$$

A nem görbült falak esetén ebben a kifejezésben a  $\Lambda_r = d_r(q, q')/l_1$  nagyítás jelenik meg visszaadva a (2.31) kifejezést.

## 2.4.2. A diffratív pályák járulékai

A 2.1.c, ábrán látható *alap* diffratív periodikus pályákra kiszámítottuk a geometriai szakaszokon az effektív sugarat ( $r_b^{\text{eff}}$ ), a pálya geometriai részének hosszát ( $L_b^G$ ) és a diffratív csúszás hosszát ( $L_b^D$ ). Az első tíz *alap* diffratív pálya adatait a 2.1. táblázatban adjuk meg.

A táblázatban felsoroltakon kívül még egy *alap* primitív pálya létezik. Ez  $2\pi a$  hosszúságú és a diszk felszínén halad mindvégig, geometriai szakasza nincs. A spektráldetermináns diffratív részét végül

$$Z_D(k) = 1 - e^{2\pi(ik - \alpha)a} - \sum_b \mathcal{D}^2 (-1)^{n_b} \frac{e^{-i3\pi/4} e^{ik(L_b^G + L_b^D) - \alpha L_b^D}}{\sqrt{k r_b^{\text{eff}}}} \quad (2.36)$$

adja, ahol  $\mathcal{D}$  a (2.5) diffrációs állandó. A szumma az *alap* pályákra vonatkozik, melyek a 2.1. táblázatban vannak felsorolva. A 2.3. ábrán láthatjuk

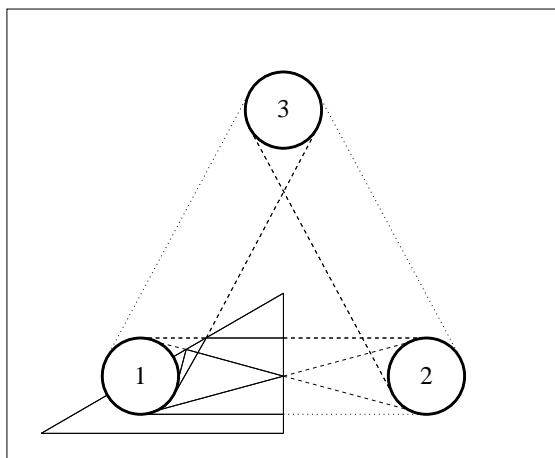
$n_b$	$L_b^G/a$	$r_b^{\text{eff}}/a$	$L_b^D/a$
0	5.656854249492	5.656854249424	3.821266472498
0	6.000000000000	6.000000000000	3.141592653589
1	9.832159566199	58.16784043380	3.476488812029
1	9.797958971132	58.78775382679	3.544308495170
2	13.81654759452	578.1406653460	3.507404058891
2	13.81309379078	579.7434283719	3.514253447057
3	17.81499162871	5729.649817456	3.510488616089
3	17.81464272590	5732.235502463	3.511180541615
4	21.81483475355	56728.70010470	3.510799703655
4	21.81479950722	56732.26871144	3.510869602322

2.1. táblázat: A tíz *alap* diffraktív pálya adatai a két diszk rendszerben  $a : R = 1 : 6$  esetén. ( [Vattay, Wirzba, Rosenqvist 1994] alapján.)

$Z_D(k)$  zérushelyeit, amelyek néhány százalékkal pontosabbal reprodukálják az egzakt rezonanciákat.

## 2.5. A három diszk rendszer

A két diszk rendszer nem tekinthető igazán kaotikusnak. A rendszer pályái instabilak, de a periodikus pályák száma nem nő exponenciálisan. A két diszk rendszer egy másik nem generikus tulajdonsága, hogy a rezonanciákat  $Z_D$  és  $Z_{sc}$  zérushelyeiből külön-külön számíthattuk ki. Ezért célszerű az igazán kaotikus három diszk rendszert [Rosenqvist, Vattay, Wirzba 1996] is megvizsgálni. Először a három diszk rendszer *alap* diffraktív periodikus pályáit vizsgáljuk meg, melyek egyetlen kúszó szakaszt tartalmaznak. Hogy képet kapjunk az elvégzendő feladatról, először leszámoljuk ezeket a pályákat. Vizsgálatainkat ismét a fundamentális tartományban végezzük. A szimmetria miatt feltehetjük, hogy az *alap* diffraktív pálya az 1-gyel jelölt diszk felszínéről indul érintőlegesen. Ha először csak olyan pályákat tekintünk, melyekben nincs ütközés, azt látjuk, hogy az 1-es diszket elhagyva a két másik diszk valamelyikének felszínére juthatunk, és mindkét felszínen két irányban kúszhatunk körbe. Így már rögtön négy különböző 1 topológiai hosszúságú *alap* primitív periodikus pályát találhatunk. Amikor ezeket a pályákat a fundamentális tartományban ábrázoljuk, azt találjuk, hogy kettő közülük egybeesik, a másik kettő pedig ugyanazt az utat járja be egymással



2.4. ábra: A teljes három diszk rendszer a fundamentális tartomány egy példányával. Az 1 topológiai hosszúságú diffraktív pályákat a teljes tartományba visszavetítve és a fundamentális tartományban is láthatjuk. [Rosenqvist, Vattay, Wirzba 1996]

ellenkező irányban.

Az alap diffraktív pályákat kódolhatjuk az általuk a teljes rendszerben bejárt diszkek sorozatának  $1\alpha_1\alpha_2 \dots \alpha_n$  megadásával, ahol az  $\alpha_i$ -ket az  $\{1, 2, 3\}$  közül válsztatjuk, és nem engedünk meg olyan ismétléseket mint  $\dots 11\dots$ ,  $\dots 22\dots$  és  $\dots 33\dots$ . Ez a leírás tartalmaz egy kétszeres degenerációt, mivel a pálya végén az utolsó diszket két különböző irányban is bejárhatjuk. Például '123' két olyan különböző pályát reprezentál, amelyek az 1-gyel jelölt diszkről indulnak, ütköznek a 2-es diszkkal és végül a 3-as diszk felszínén kúsznak az óra járásával megegyező vagy ellentétes irányban. Ha most az  $m$  ütközést végző pályákat tekintjük, akkor belátható, hogy e mechanizmus segítségével  $2^{n+1} = 2^{m+2}$  darab  $n$  topológiai hosszúságú diffraktív pályát generálhatunk. A diffraktív pályák száma tehát exponenciálisan nő a topológiai hosszal. Egészen megdöbbentő, hogy – amint azt látni fogjuk – már néhánynak a figyelembevétele elegendő a szórási rezonanciák kiszámításához.

Az a feltétel, hogy a kúszó diffraktív pályák mindig érintőlegesen indulnak és érkeznek meg az első és az utolsó diszkre, nagyban megkönnyíti megkeresésüket. Tegyük fel, hogy előírjuk a pálya által bejárt diszkek sorozatát és az utolsó diszk körüljárási irányát. Ezután az első diszk felszínéről érintőlegesen indulva megkeressük az indulási pontok azon tartományát, ahonnan a

$p_c$	$R_b^{\text{eff}}/a$	$L_b^G/a$	$L_b^D/a$
12	6.000000	6.000000	4.188790
12	5.656854	5.656854	3.821266
13	6.000000	6.000000	2.094395
13	5.656854	5.656854	3.821266
121	58.167840	9.832159	4.523686
121	58.787753	9.797958	3.544308
131	58.167840	9.832159	2.429291
131	58.787753	9.797958	3.544308
123	66.352162	10.120809	4.384819
123	73.492203	10.147842	3.478142
132	84.855171	10.120809	2.678761
132	73.492203	10.147842	3.478142

2.2. táblázat: Az alap diffraktív periodikus pályák adatai a három diszk rendszerben az  $a : R = 1 : 6$  esetben.

következő előírt diszk elérhető. Utána ezt az intervallumot újra végigtagogatva megtaláljuk azt a még kisebb szakaszt, ahonnan az első után a második előírt diszket is elérjük. Ezt folytatjuk az utolsó diszk eléréséig. Itt megkeressük azt a konkrét pontot, ahonnan indulva az utolsó diszket éppen érintőlegesen érvük el. A 2.5. táblázat mutatja a három diszk rendszer így megkeresett alap diffraktív pályáinak adatait.

A három diszk rendszer esetén a spektráldetermináns kiszámítása némileg bonyolultabb mint a két diszk esetén volt. A spektráldetermináns kummuláns kifejtést kell készítenünk egy  $z$  segédváltozó segítségével a már ismert módon:

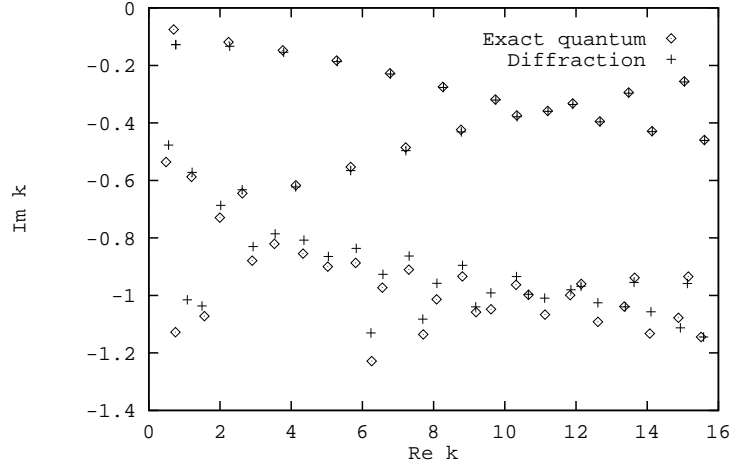
$$Z_{sc}(E, z)Z_D(E, z) = 1 - Q_1(E)z - \dots \quad (2.37)$$

Ehhez azonban a spektráldetermináns diffraktív részében is be kell vezetni a  $z$  változót. Ezt itt is természetesen megtehetjük, ha a spektráldetermináns minden tagját beszorozzuk a hozzá tartozó  $z^{rn_p}$  faktorial, ami a topológikus hosszukat tartja nyilván:

$$Z_D(E, z) = \exp \left( - \sum_{p,r=1}^{\infty} \frac{z^{rn_p}}{r} \prod_{i=1}^{n_p} [D(q_i^p)G(q_i^p, q_{i+1}^p, E)]^r \right). \quad (2.38)$$

Végül a kummuláns sor csonkolása és  $z = 1$  behelyettesítése után a rezonanciákra kapott eredmény a 2.5. ábrán látható. Ezt célszerű az 1.9. ábrával összevetni, ahol a diffraktív pályák még nem voltak figyelembevétel.

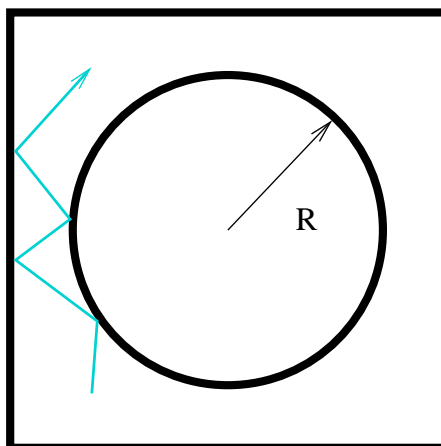




2.5. ábra: A három diszk rendszer egzakt kvantummechanikai ( $\diamond$ ) és a diffrakciós pályákat is tartalmazó szemiklasszikus (+) rezonanciái  $a : R = 1 : 6$  paraméternél. A számításhoz elegendő volt a max. 4 topológiai hosszúságú diffraktív és geometriai pályákat figyelembevenni. Látszik, hogy a 1.9. ábrához képest a mélyebben fekvő és kisebb reális részű rezonanciák is kvalitatíve jól reprodukálódhatnak. ([Rosenqvist, Vattay, Wirzba 1996] alapján.)

## 2.6. Diffrakció egy zárt rendszerben

A két nyílt szóró rendszer vizsgálata azt mutatta, hogy a diffrakció szemiklasszikus leírása jó eredményeket ad a szórási rezonanciák helyére a komplex energia ill. hullámszám síkon. Most egy újabb egyszerű rendszer segítségével azt vizsgáljuk meg, hogy zárt rendszerek valós, diszkrét energiaszintjei esetén mennyire alkalmazható a módszer. A 2.6. ábrán az egyik leggyakrabban vizsgált zárt kaotikus rendszert, az ún. Sinai biliárdot láthatjuk. A diszk és a doboz kemény fala között egy tömegpont pattog. Mozgása ergodikus és erősen kaotikus [Sinai 1968]. Az előző fejezetekben vizsgált "kúszó" diffrakció szerepe valós energiák esetén nem jelentős, mert a (2.7) Green függvény a valós energia tengelyen exponenciálisan kicsi. A Sinai biliárdban erős diffrakció akkor lép fel, ha a diszk rádiusza olyan kicsi, hogy az összemérhetővé válik a mozgó részecske hullámhosszával ( $kR \approx 1$ ). A továbbiakban megvizsgáljuk, hogy a diffrakció periodikus pálya elmélete hogyan alkalmazható ebben az e-



2.6. ábra: A Sinai billiard. A tömegpont az egységnyi oldalú, négyzet alakú doboz fala és a középső  $R$  sugarú diszk között pattoghat.

setben [Dahlqvist, Vattay 1998].

### 2.6.1. A Sinai biliárd a kis diszk határesetben

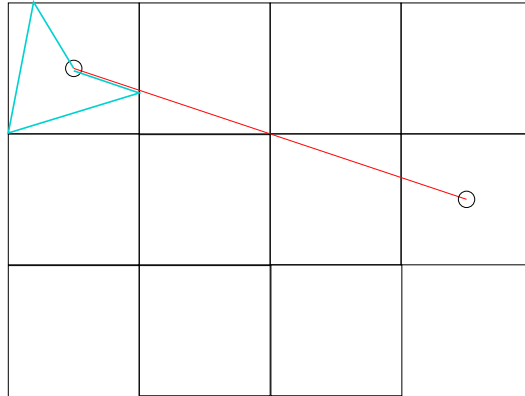
A kis diszk a hullámtérbe helyezve elsősorban két dimenziós S hullámokat kelt. A  $kR \rightarrow 0$  határesetben a diffrakciós állandó domináns járulékát a

$$\mathcal{D}(k) = -4i \frac{J_0(kR)}{H_0^{(1)}(kR)} \Rightarrow \frac{-4i}{1 + i\frac{2}{\pi}(\ln(kR/2) + \gamma)} \quad , \quad (2.39)$$

szögfüggetlen kifejezés adja [Rosenqvist, Whelan, Wirzba 1996]. Szemiklasszikusan a kis diszket eltaláló klasszikus pályák a diffrakció geometriai elméletének megfelelően minden irányban azonos valószínűséggel folytathatók.

Tekintve, hogy a rendszerben csupán egy diffraktív pont van, az *alap* diffraktív periodikus pályák megtalálása viszonylag egyszerű: Azokat a pályákat kell megkeresni, melyek a diffraktív pontból indulnak, és oda térnek vissza. Ezeket a pályákat úgy lehet a legkönnyebben megtalálni, ha a négyzetet falaira tükrözzük, és a falakon ütköző pályákat a tükörkép négyzetekben folytatjuk. A tükrözött négyzeteket tovább tükrözve oldalaik mentén, a pályák síkba kiterített változatai egyenes vonalakká válnak.

A 2.7. ábrán láthatjuk, hogy a négyzet középpontjából induló, és oda visszatérő pályák síkban kiterítve olyan egyenes vonalak, melyek az egyik



2.7. ábra: Egy *alap* diffraktív pálya az eredeti négyzetben és a síkban kiterítve.

négyzet közepét kötik össze a többi négyzet középpontjával. Amennyiben eredeti négyzetünk középpontját az origóba helyezzük, az összekötő vonalak olyan  $\rho = (\rho_x, \rho_y)$  rácsvektorral jellemezhetők, ahol  $\rho_x$  és  $\rho_y$  egész számok.

A spektráldetermináns diffraktív részét a (2.22) kifejezés felhasználásával számíthatjuk ki. Az egyes pályák súlyait a (2.19) formula adja meg. A kétdimenziós szabad Green függvény

$$G_{free}(x, x') = -\frac{i}{4} H_0^{(1)}(k|x - x'|) \quad (2.40)$$

kifejezését felhasználva a  $\rho$  vektorral jellemzett *alap* diffraktív periodikus pálya súlya

$$t_\rho = -\frac{i}{4} (-1)^{|\rho_x| + |\rho_y|} \mathcal{D}(k) H_0^{(1)}\left(k\sqrt{\rho_x^2 + \rho_y^2}\right), \quad (2.41)$$

ahol már azt is kihasználtuk, hogy a kemény falakon  $n_r = |\rho_x| + |\rho_y|$  számú ütközés történik, és ezt (2.31) szerint, egy  $(-1)^{n_r}$  fázis faktoral figyelembe kell venni. A spektráldetermináns pedig

$$Z_D(k) = 1 - \sum_b t_b = 1 + \frac{i}{4} \mathcal{D}(k) \sum_\rho (-1)^{|\rho_x| + |\rho_y|} H_0^{(1)}\left(k\sqrt{\rho_x^2 + \rho_y^2}\right) \quad (2.42)$$

alakúnak adódik. Ez a kifejezés még nehezen használható energiaszintek számítására, mivel a kifejezés tagjai komplex számok, és az összeg sem abszolút konvergens. Azonban ez az összegzés a szilárdtest fizikából jól is-

mert Korringa-Kohn-Rostoker (KKR) módszerben bevezetett struktúra állandókhoz hasonlóan valós és gyorsan konvergáló kifejezéssé szummálható át, amint azt Berry [Berry 1981] megmutatta. Az Ewald összegzés szerint az

$$S_0(k) = -\frac{i}{4} \sum_{\rho \neq \mathbf{0}} H_0^{(1)}(k\rho) (-1)^{\rho_x + \rho_y} \quad (2.43)$$

KKR "struktúra állandó" átírható az

$$S_0(k) = \frac{i}{4} + \frac{1}{4\pi^2} \sum_{\mathbf{v}} \frac{\exp(Q[1 - v^2 4\pi^2/k^2])}{k^2/4\pi^2 - v^2} - E_i(Q)/4\pi \quad (2.44)$$

alakba, ahol bevezettük a  $\mathbf{v}$  duális rácsvektorokat:

$$\mathbf{v} = \left( v_x + \frac{1}{2}, v_y + \frac{1}{2} \right), \quad (2.45)$$

és  $v_x, v_y$  egész számok,  $E_i$  az exponenciális integrál [Abramowitz, Stegun 1972],  $Q \rightarrow +0$  pedig a kifejezés regularizálásához szükséges kis pozitív szám. Viszszahelyettesítve az Ewald reszummált KKR struktúra állandót, a spektráldetermináns a következő alakra hozható:

$$\begin{aligned} Z_D(k) &= 1 + \frac{4iJ_0(kR)}{H_0^{(1)}(kR)} S_0(k) \\ &= \left( 1 - \frac{J_0(kR)}{H_0^{(1)}(kR)} \right) \cdot \left( 1 - \frac{J_0(kR)}{Y_0(kR)} \left[ \frac{1}{\pi^2} \sum_{\mathbf{v}} \frac{\exp(Q[1 - v^2 4\pi^2/k^2])}{k^2/4\pi^2 - v^2} - E_i(Q)/\pi \right] \right). \end{aligned} \quad (2.46)$$

Az energia sajátértékeket a spektráldetermináns zérushelyei adják:

$$Z_D(k) = 0. \quad (2.47)$$

Mivel a spektráldetermináns szorzat alakú, könnyen belátható, hogy a (2.46) kifejezés zérushelyei megegyeznek a szorzat második tagjának zérushelyeivel:

$$0 = 1 - \frac{J_0(kR)}{Y_0(kR)} \left[ \frac{1}{\pi^2} \sum_{\mathbf{v}} \frac{\exp(Q[1 - v^2 4\pi^2/k^2])}{k^2/4\pi^2 - v^2} - E_i(Q)/\pi \right], \quad (2.48)$$

ami egy tisztán valós kifejezés.

Numerikus számításokat úgy végezhetünk, ha  $Q$ -t egy kis értékre állítjuk be, és adott maximális nagyságú  $\mathbf{v}$  vektorokig végezzük el az összegzést. Minél kisebb  $Q$  értéke, annál nagyobb vektorokig kell összegeznünk a konvergencia érdekében, de a kifejezés csökkenő  $Q$ -val egyre pontosabb lesz.

## 2.6.2. Az energiaszintek perturbatív vizsgálata

A kifejezés  $k^{(0)2} = \pi^2((2v_x + 1)^2 + (2v_y + 1)^2)$  pólusai az üres négyzet olyan energiaszintjeinél találhatóak, melyek hullámfüggvénye a négyzet  $C_{4v}$  szimmetria csoportjának  $A1$  irreducibilis ábrázolása szerint invariáns, azaz  $x$  és  $y$  irányban is páros függvény az origóban. A négyzet szimmetria csoportjának  $A2$ ,  $B1$  és  $B2$  reprezentációival szemben invariáns hullámfüggvények értéke a négyzet középpontjában zérus. Ezekhez a hullámfüggvényekhez tartozó energiaszinteket a diffrakció nem érinti, és így változatlanok maradnak egy infinitezimálisan kis diszk esetén.

Az  $A1$  szimmetria osztályba tartozó szintek meghatározása viszonylag egyszerű, mert a (2.48) kifejezés jobb oldala két egymást követő pólus singularitás között monoton csökkenő módon változik. A pólusok közti intervallumot intervallum felezéses módszerrel megvizsgálva, az intervallumban található egyetlen zérushely könnyen meghatározható.

Ha  $J_0(kR)/Y_0(kR)$  kicsi, akkor a (2.48) kifejezés zérushelyeinek közel kell lenniük a pólusokhoz. Egy pólushely közelében (2.48) jól közelíthető úgy, hogy a többi pólushely hatását figyelmen kívül hagyjuk, és a

$$0 = 1 - \frac{J_0(kR)}{Y_0(kR)} \frac{1}{k^2/4 - \pi^2 v^2} \quad (2.49)$$

közelítő egyenletből határozhatjuk meg az energiaszinteket, ami a

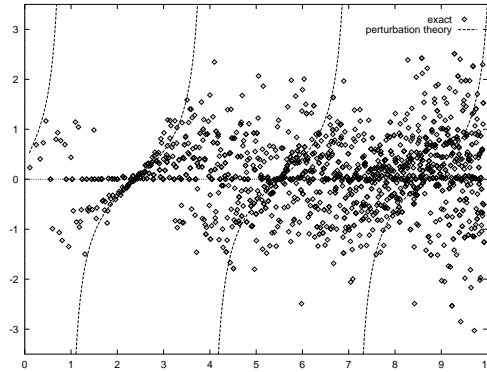
$$k^2 \approx k^{(0)2} - 4 \frac{J_0(kR)}{Y_0(kR)} \quad (2.50)$$

perturbatív eredményre vezet.

A 2.8. ábrán összehasonlítjuk a Sinai biliárd energiáit és a perturbatív eredményt az  $R = 0.025$  esetén. Megjegyezzük, hogy a négyzet  $n$ -szeresen degenerált energiaszintjei esetén  $n - 1$  energiaszint nem változik meg az első rendű perturbáció számítás hatására, és csak egy tolódik el. Látható, hogy a  $J_0$  Bessel függvény első zérushelye közelében a legjobb a közelítés, magasabb energiák esetén már nem elég a kis diszket pontszerű diffrakciós centrumként figyelembe venni, és a közelítés elromlik.

## 2.6.3. A diffrakció hatása az energiaszintek statisztikájára

A kvantum káosz és a mezoszkopikus fizika egyik alapkérdése a klasszikus dinamika és a rendszer kvantumos megfelelőjének energiaszintjei közti kap-

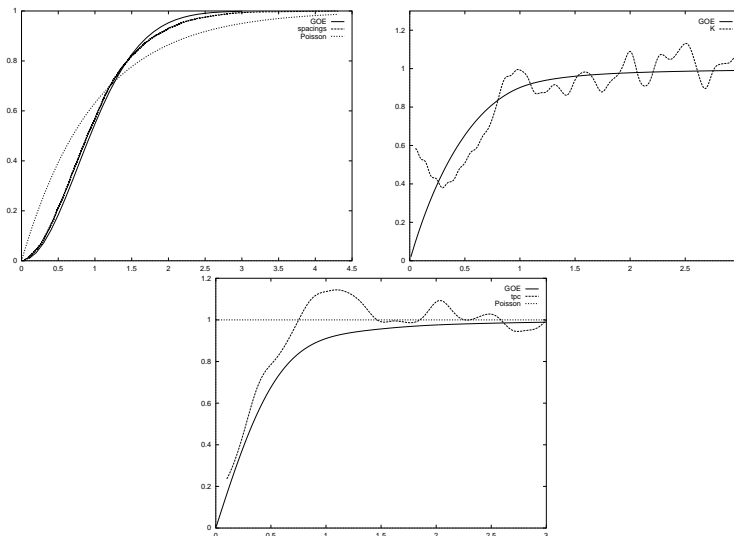


2.8. ábra: A Sinai biliárd és az üres négyzet megfelelő energiaszintjeinek  $k^{(0)^2} - k^2$  különbsége összehasonlítva a perturbatív eredménnyel  $\left(4 \frac{J_0(kR)}{Y_0(kR)}\right)$ . Az energiaszintek mind az  $A_1$  szimmertia osztályba tartoznak, és a kis diszk sugara  $R = 0.025$ . [Dahlgvist, Vattay 1998]

csolat (ld. [Eckhardt 1988, Haake 1991] összefoglalókat). A jelenleg elfogadott várakozás [Bohigas, Giannoni 1984] az, hogy a kaotikus rendszerek energiaszintjeinek korrelációja a szemiklasszikus határesetben megegyezik a Wigner által bevezetett Gauss véletlen mátrix sokaságok (ortogonális, unitér vagy szimplektikus) korrelációival, míg az integrálható rendszerek energiaszintjei korrelálatlanok és Poisson statisztikát követnek [Berry, Tabor 1974]. Újabban a heurisztikus megfontolásokon túl új analitikus eredményeket vezettek le [Andreev, Altshuler 1995], [Agam, Andreev, Simons 1997], melyek a kvantum szintstatisztikát a klasszikus Perron-Frobenius operátorral hozzák kapcsolatba. Ezeknek az új eredményeknek egyik következménye, hogy ott várhatunk lényeges eltéréseket a véletlen mátrix elmélettől, ahol a fázistérben a kaotikus keverés karakterisztikus ideje ( $T_{mix}$ ) összemérhető az energiaszintek átlagos  $\Delta$  távolságából származtatott  $T_H = \hbar/\Delta$  Heisenberg idővel. Egy szokásos klasszikus kaotikus rendszerben a keverési idő egy klasszikus ( $\sim \hbar^0$ ) mennyiség, míg a Heisenberg idő tipikusan  $\sim 1/\hbar^{d-1}$ -ként viselkedik egy  $d$  dimenziós rendszerben, és divergál a  $\hbar \rightarrow 0$  határesetben. A Heisenberg idő így tipikusan nagy a keverési időhöz viszonyítva. Lassú keverés és nagy keverési idő várható, ha egy integrálható, nem keverő rendszerbe egy olyan kis pontszerű szórócentrumot helyezünk, melyen csak a diffrakció okoz keverést. A diffrakciós szórási amplitudó  $\hbar^2$ -tel arányos, és a diffrakció okozta keverés

karakterisztikus ideje  $\sim 1/\hbar$ -ként viselkedik. Kétdimenziós rendszerekben a diffrakciós keverési idő és a Heisenberg idő összemérhető egymással. Ezért arra számíthatunk, hogy kétdimenziós diffraktív rendszerek szintstatisztikája lényeges eltérést fog mutatni a megszokott véletlen mátrix sokaságoktól.

Ezt a feltételezést megerősíthetjük, ha megvizsgáljuk a Sinai biliárd szintstatisztikáját kis szórócentrum esetén. A degenerált szintektől úgy szabadul-



2.9. ábra: Az **a**, ábrán az egymás után következő szintek távolságának statisztikáját mutatja a téglalap alakú Sinai biliárd esetén a  $c = 0$  esetben. A vastag vonal a Gauss ortogonális random mátrixok sajátértékeinek távolság statisztikáját, a szaggatott vonal a Poisson eloszlású energiaszintek távolságának eloszlását mutatja. Látható, hogy a statisztika nagyon közel van a véletlen mátrix elmélet jóslatához, de attól szignifikánsan eltér. A **b**, ábrán a kétpont korrelációs függvény Fourier transzformáltja látható ugyanezre az esetre. A vastag vonal a véletlen mátrix elmélet jóslata. Szignifikáns eltérések láthatók  $\tau \approx 0$  és  $\tau \approx 1$  körül. A **c**, ábrán a kétpont korrelációs függvény látható. Az  $\epsilon \approx 1$  körül a véletlen mátrix elmélettől szignifikánsan eltérő csúcs figyelhető meg [Dahlvqvist, Vattay 1998].

hatunk meg, ha négyzet helyett egy irracionális arányban álló oldalakkal rendelkező téglalap középpontjába helyezzük el a kis diszket. Számításainkat konkrétan egy  $1 : 2^{1/4}$  téglalpra végeztük el az  $A1$  szimmetria osztályban.

Két gyakran vizsgált statisztikát tanulmányoztunk. Az egyik az egymást követő szintek távolságának kummulatív eloszlása:

$$P(s) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \theta(s - (e_{n+1} - e_n)/\Delta_e) \quad , \quad (2.51)$$

ahol  $\Delta_e$  az átlagos szinttávolság az  $e$  energia közelében és  $\theta(x)$  a lépcsőfüggvény. A másik a kétpont korrelációs függvény:

$$R(\epsilon) = \langle \sum_{ij} \delta((\epsilon - e_i + e_j)/\Delta_e) \rangle_e, \quad (2.52)$$

ahol az átlagolást sok energiaszintet tartalmazó energia intervallumra végzük el. A kétpont korreláció Fourier transzformáltját, az ún. forma faktort is kiszámítjuk:

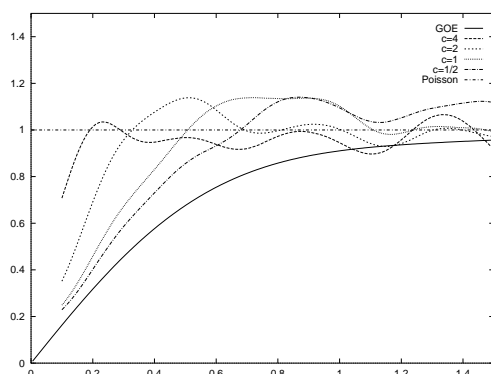
$$K(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{2\pi i \tau \epsilon} (R(\epsilon) - 1) d\epsilon. \quad (2.53)$$

A vizsgálatokat úgy végeztük, hogy egy  $k_0$  körüli  $\Delta k$  intervallumot választottunk, oly módon, hogy az intervallumban  $c = Y_0(kR)/J_0(kR)$  értéke állandónak legyen tekinthető, mégis az intervallumba sok ( $\sim 5000$ ) energiaszint essen. Ez  $R$  megfelelően kicsi választása és  $k_0 R$  rögzítése mellett mindig elérhető.

A 2.9. ábrán a  $c \approx 0$  esetet látjuk 5000 energiaszint esetén. Látható, hogy a statisztika nagyon közel van a véletlen mátrix elmélet jóslatához, de attól szignifikánsan eltér. A forma faktorban is szignifikáns eltérések láthatók  $\tau \approx 0$  és  $\tau \approx 1$  körül, a kétpont korrelációs függvényben pedig  $\epsilon \approx 1$  körül. A 2.10. ábra a kétpont korrelációs függvényt mutatja a  $c$  értékek egy geometriai sorozatára. Látható, hogy növekvő  $c$  értékek esetén a véletlen mátrix elmélettől a Poisson eloszlás felé tolódnak el a statisztikák.

Munkánk nyomán [Dahlqvist, Vattay 1998] később analitikus számítások segítségével is sikerült megmutatni [Sieber 1999, Sieber 2000], hogy az egy diffrakciós centrumot tartalmazó integrálható rendszerek szintstatisztikái új, a GOE statisztikától különböző szintstatisztikával rendelkeznek. Bebizonyosult, hogy a keverési idő és a Heisenberg idő összehasonlításán alapuló kvalitatív megfontolásaink helyesek voltak.





2.10. ábra: A kétpont korrelációs függvény a téglalap Sinai biliárd esetén  $c$  értékeinek egy geometriai sorozata mellett. A GOE-val jelölt görbe jelöli a véletlen mátrix elmélet jóslatát, míg  $R(\epsilon) = 1$  a Poisson eloszlásnak felel meg. Látható, hogy növekvő  $c$  értékek esetén a véletlen mátrix elmélettől a Poisson eloszlás felé tolódnak el statisztikák [Dahlgvist, Vattay 1998].

## 2.7. Összefoglalás

Megállapíthatjuk, hogy a diffraktív trace formula komoly kvalitatív javulást okoz a kaotikus rendszerek spektrumának leírásában. A trace formula diffraktív korrekcióinak felismerése óta nyilvánvaló a tagok részletes megvizsgálása után, hogy a diffraktív pályák járuléka  $\hbar$  hatványai szerint

$$\frac{e^{iS_j/\hbar}}{\hbar} \hbar^\alpha$$

rendűek, ahol  $0 < \alpha < 1$  a diffrakció fajtájától függően. A diffrakciós járulékok az (1.81) sorfejtés vezető rendje és első korrekciója közé „ékelődnek” be. Ennek megfelelően általában elmondhatjuk, hogy a diffrakciós járulékok egy tipikus esetben gyengébbek, mint a vezető szemiklasszikus járulékok, de erősebbek, mint a szemiklasszikus járulékok szokásos  $\hbar$  hatványai szerinti analitikus perturbatív korrekciók. Mivel a diffrakciós járulékok új periodikus pályák formájában jelentkeznek, melyekhez  $e^{iS_j/\hbar}$  fázis faktorok tartoznak, lényegesen megváltoztatják a periodikus pályák járulékaiknak interferenciáit a trace formulában, lehetőséget adva új rezonanciák vagy energiaszintek megjelenésére. A diffraktív periodikus pályák képesek befolyásolni az energiaszintek statisztikáját is és új, korábban nem vizsgált szintstatisztikát ered-

ményeznek. Érdekes megjegyezni, hogy a diffraktív rendszerek kapcsán talált új szintstatisztikák terén jelenleg is intenzív kutatások folynak [Agam 1995], [Agam, Fishman 1996], [Agam, Fishman 1997], [Dahlqvist 1999(2)], [Bogomolny, Leboeuf, Schmit 2000], [Bogomolny, Giraud, Schmit 2001], [Sieber 1999], [Sieber 2000], melynek egyik motivációja az, hogy ezek a statisztikák jelennek meg a fém-szigetelő átmenetet mutató szennyezett vezető rendszerek kritikus pontjában is [Shkolvskii et al. 1993], [Zharekeshev, Kramer 1997].

Az általunk bevezetett diffraktív periodikus pályák koncepciója a biliárd rendszerek szemiklasszikus kvantálásán túl (ld. a [Diffraktív periodikus pályák biliárdokban] felsorolást) az elmúlt években hasznosnak bizonyult számos olyan egymástól távol eső területen, mint a Casimir effektus [Schaden, Spuch 1998], [Bulgac, Wirzba 2001], a neutron anyag fizikája [Bulgac, Mager-ski 2001], a vízhullámok fizikája [Creagh, Dimon 1997], mikrohullám rezonátorok [Kudrolli, Sridhar 1997], [Sirko, Koch, Blumel 1997], [Hersch, Haggerty, Heller 1999], [Stöckmann 1999], [Bauch et al. 1998] az atomok és molekulák fizikája [Friedrich 1997], [Dando, Monteiro, Owen 1998], [Walker, Monterio 2000], [Owen, Monterio, Dando 2000], a kölcsönható rendszerek [Sakhr, Whelan 2000] és a mezoszkopikus vezetők fizikája, amiről a következő fejezetekben lesz szó.

## 3. Fejezet

# Diffraktív pályák mezoszkopikus vezetőekben

Az elmúlt években a mezoszkopikus mérettartományban működő berendezések fizikájában [Beenakker, Houten 1991] is népszerűvé váltak a szemiklasszikus módszerek [Richter 2000]. Manapság ezeknek a leírására az elméleti eszközök két teljesen különböző fajtáját használják. Egyik az eddig ismertett szemiklasszikus közelítés, ahol a klasszikus pályák, káosz, rendezettség és a potenciál analitikus tulajdonságai a kulcsszavak. A másik középpontjában olyan fogalmak állnak mint a véletlen mátrixok vagy véletlen Gauss potenciálokra való átlagolás [Efetov 1983]. Az első arra való, hogy tiszta rendszereket írjon le, ahol a potenciál simán függ a koordinátáktól és paramétereiktől, míg a második szennyeződésekkel teletűzdelt rendszereket képzel maga elé, melyekben a potenciál minden hosszúságskálán fluktuál. Szerencsére az új anyagok tervezésében és előállításban a nyolcvanas évek óta bekövetkezett fejlődés lehetővé tette, hogy a szennyeződések száma exponenciálisan csökkenjen, és ez a trend a jövőben is folytatódni fog. Ma már végezhető olyan kísérletek [Marcus et al. 1992, Keller et al. 1994] hibrid nanostruktúrákban, ahol az elektronok kvantum koherencia hossza és a rugalmas ütközések szabad úthossza nagy a mezoszkopikus vezető méreteihez képest. Ezekben az eszközökben az elektronok kétdimenziós, ideális, nem kölcsönható Fermi gáznak tekinthetők. A berendezések konduktanciája mérhető, és erősen fluktuál a Fermi energia függvényében. Ennek megfelelően egy realisztikus szemiklasszikus elméletnek képesnek kell lennie olyan rendszerek leírására, amelyekben a szennyezők száma kicsi, de se nem tiszták, se nem erősen szennyezettek. A mai eszközöknek még – az emberi tervezés miatt – saját-

sága az is, hogy gyakran egyenes falak határolják, melyek ékszerű sarkokban találkozhatnak. Ezek a rendszerek – szoros értelemben véve – se nem kaotikusak, se nem regulárisak, hanem e két kategória közé eső, az ún. pszeudo integrálható rendszerek kategóriájába tartoznak. Ezeknek is természetesen bele kell illeniük a szemiklasszikus leírásba.

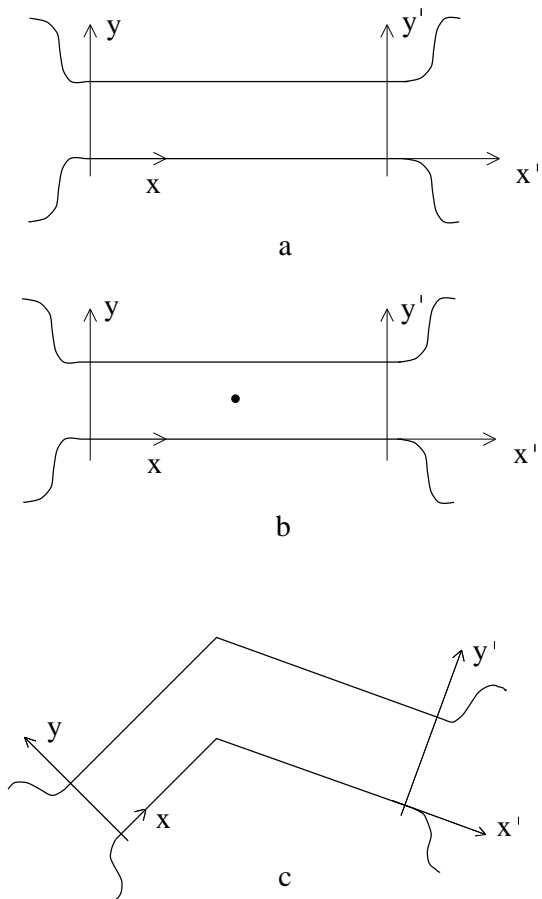
Ebben a fejezetben [Vattay et al. 1997], [Cserti, Szálka, Vattay 1997], [Cserti, Szálka, Vattay 1998] és [Dittrich et al. 1999] alapján bemutatjuk, hogy hogyan lehet leírni ezeket a pszeudó integrálható mezoszkopikus vezetőket az előző fejezetben kidolgozott diffraktív periodikus pályák segítségével.

### 3.1. Példák pszeudo integrálható rendszerekre

A legegyszerűbb mezoszkopikus berendezés egy kétdimenziós elektron gázból álló hullámvezető cső, melyet GaAs heterostruktúrákon alakítanak ki, és két elektron rezervoárhoz (Ohmikus mérési ponthoz) kötik (3.1.a, ábra). Ez a rendszer felfogható úgy is mint egy bonyolultabb két- vagy három dimenziós tiszta kvantum nanocső (pl. szén nanotubus) idealizált megtestesítője. Ebben a fejezetben megvizsgáljuk ezt az egyszerű kvantum csövet és még két módosított változatát is: az egy pontszennyezőt tartalmazó csövet (ld. 3.1.b, ábra) [Bagwell et al. 1990], és a megtört hullámvezető csövet (ld. 3.1.c, ábra) [Catini et al.]. A vizsgálandó rendszerek kiválasztásában az motivált, hogy ezekből az egyszerű építőközből már felépíthetők hosszabb, szennyezőket és sarkokat is tartalmazó csövek. Az egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy a csövek fala teljesen kemény és a hullámfüggvény eltűnik rajta (Dirichlet határfeltétel). A hullámvezetők belsejében a potenciál értékét nullának tekintjük.

### 3.2. A Landauer-Büttiker Formula

A mezoszkopikus elektron vezetők konduktanciáját  $T = 0$  hőmérsékleten a Landauer-Büttiker formula [Landauer 1957], [Büttiker 1986] adja meg. A mezoszkopikus vezető az Ohmikus kontaktusokhoz hullámvezetőkkel csatlakozik. Egy tipikus elrendezést mutat a 3.2. ábra. Az elmélet szerint a befutó és kifutó hullámfüggvények a kétdimenziós hullámvezető csövekben



3.1. ábra: Elektron rezervoárok (Ohmikus kontaktusok), melyeket kétdimenziós cső alakú hullámvezetők kötnek össze. **a**, Ideális cső párhuzamos falakkal. **b**, Ideális cső párhuzamos falakkal és egy pontszerű szennyezővel. **c**, Megtört cső alakú hullámvezető.

## A vezetőképesség kiszámítása

A ki és bemeneti hullámvezetőkben a hullámfüggvény módusokra bontható

$$\psi_n(x, y) = \Phi_n(y)e^{ik_n x},$$

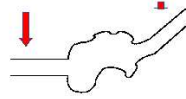
$$\Phi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin(\pi n y / W),$$

$$k_n = \sqrt{2mE_F - (\hbar\pi n / W)^2} / \hbar,$$

A módusok közötti szórás amplitudó  $t_{mn}$

A vezetőképesség a szórás amplitudók négyzetösszege (Landauer 1957)

$$G(E_F) = \sum_{m,n} |t_{mn}|^2$$



3.2. ábra: A középben elhelyezkedő mezoszkopikus berendezést egyenes vezető csövek kötik az Ohmikus mérési pontokhoz.

felbonthatók a keresztirányú módusok szerint:

$$\begin{aligned} \psi_n(x, y) &= \Phi_n(y)e^{ik_n x}, \\ \Phi_n(y) &= \sqrt{\frac{2}{W}} \sin(\pi n y / W), \end{aligned} \quad (3.1)$$

ahol  $k_n = \sqrt{2mE_F - (\hbar\pi n / W)^2} / \hbar$  az adott módusban haladó síkhullám hullámszáma,  $W$  a vezető szélessége,  $E_F$  a Fermi energia. Ha a Fermi energia kisebb mint  $E_n = \frac{1}{2m}(\hbar\pi n / W)^2$ , akkor a  $k_n$  hullámszám imaginárius, és az  $n$ . módus zárttá válik, és benne a hullámterjedés nem lehetséges. A vezetési módusokat csatornáknak is hívják.

A konduktanciára vonatkozó Landauer-Bütiker formula  $E_F$  Fermi energia esetén

$$G(E_F) = \frac{2e^2}{h} \sum_{m,n} |t_{mn}|^2 \quad (3.2)$$

alakú, ahol  $t_{nm}$  az  $n$ . bemenő és az  $m$ . kimenő módus közti transzmissziós amplitudó. Végtelen hosszú csövek esetén a zárt módusok nem adnak járulékot, és elegendő a nyitott módusokra összegezni. Az transzmissziós amplitudók kiszámíthatók a rendszer Green függvényének ismeretében, ha

a Green függvényt a keresztirányú módusok  $\Phi_n(y)$  ill.  $\Phi'_m(y')$  bemeneti ill. kimeneti oldali hullámfüggvényeire vetítjük [Baranger, Stone 1989]:

$$t_{nm} = 2i(k_n k'_m)^{1/2} \int dy dy' \Phi_n(y) G^+(x, y|x', y') \Phi'_m(y'), \quad (3.3)$$

ahol  $x$  és  $x'$  a bemenő és kimenő vezetők egy-egy tetszőleges pontja (ld 3.1. a-c, ábra). Az egyszerűség kedvéért a továbbiakban a  $\hbar = 2m = 1$  konvenciót alkalmazzuk. Az azonos oldalon lévő  $n$  és  $m$  módusok közti reflexiós amplitúdót pedig hasonló módon

$$r_{nm} = \delta_{nm} - 2i(k_n k_m)^{1/2} \int dy dy' \Phi_n(y) G^+(x, y|x, y') \Phi_m(y') \quad (3.4)$$

adja, ahol  $x$  bárhol lehet a bemeneti hullámvezetőben. A valószínűség ill. áram megmaradása miatt minden  $n$  bemeneti oldali nyílt csatornára igaz a következő összegszabály:

$$\sum_m |t_{nm}|^2 + \sum_{m'} |r_{nm'}|^2 = 1, \quad (3.5)$$

ahol az összegzések a kimeneti oldali  $m$  és a bemeneti oldali  $m'$  módusokra vonatkoznak. Ezeknek a szabályoknak köszönhetően végtelen hosszú hullámvezetők esetén, ahol a zárt csatornák közti szóródás amplitúdója eltűnik, a konduktancia kifejezhető a reflexiós amplitúdókkal is:

$$G(E_F) = \frac{2e^2}{h} \left( N - \sum_{m,n} |r_{nm}|^2 \right), \quad (3.6)$$

ahol  $N$  a nyílt módusok száma a kimeneti oldalon.

A Green függvény és a konduktancia közötti ilyen direkt kapcsolat lehetővé teszi, hogy a Green függvény szemiklasszikus alakját felhasználva a konduktanciát szemiklasszikus közelítésben kiszámítsuk.

### 3.3. Szemiklasszikus transzmisszió és reflexió

Szemiklasszikusan a transzmissziós és reflexiós mátrixelemeket úgy lehet kiszámítani, ha a (3.3) ill. (3.4) kifejezésekben a Green függvényt a szemiklasszikus (1.64) Van Vleck típusú kifejezéssel helyettesítjük.

Ahhoz, hogy a szemiklasszikus kifejezéseket levezethessük, szükségünk lesz még a keresztmódusok hullámfüggvényeinek a következő exponenciálisokat tartalmazó alakjára:

$$\begin{aligned}\Phi_n(y) &= \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{2}{W}} (e^{in\pi y/W} - e^{-in\pi y/W}), \\ \Phi_m(y') &= \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{2}{W'}} (e^{im\pi y'/W'} - e^{-im\pi y'/W'}).\end{aligned}\quad (3.7)$$

Ezt felhasználva, a transzmissziós és reflexiós elemek négy integrál összegeként állnak elő:

$$\begin{aligned}r_{nm} &= r_{nm}^{++} + r_{nm}^{+-} + r_{nm}^{-+} + r_{nm}^{--}, \\ t_{nm} &= t_{nm}^{++} + t_{nm}^{+-} + t_{nm}^{-+} + t_{nm}^{--},\end{aligned}\quad (3.8)$$

ahol

$$\begin{aligned}t_{nm}^{\pm\pm} &= i(k_n k'_m)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{WW'}} \int dy dy' e^{\pm in\pi y/W \pm im\pi y'/W' - i\nu\pi/2} G^+(x, y|x', y'), \\ r_{nm}^{\pm\pm} &= \frac{\delta_{nm}}{4} - i(k_n k_m)^{1/2} \frac{1}{W} \int dy dy' e^{\pm in\pi y/W \pm im\pi y'/W - i\nu\pi/2} G^+(x, y|x, y'),\end{aligned}\quad (3.9)$$

és  $\nu = \pm 1 \pm 1$ . Ennek a felírásnak az az előnye, hogy az integrálok a  $\hbar \rightarrow 0$  szemiklasszikus határesetben kiszámíthatók a nyeregpont módszer segítségével. A Green függvénynek a kemény potenciálfalak esetére kidolgozott (2.35) szemiklasszikus kifejezését felhasználva, a  $t_{nm}^{\pm\pm}$  integráljaiban a nyeregpont feltételek (a fázis  $y$  ill.  $y'$  szerinti parciális deriváltjainak eltűnése) a következő alakot öltik:

$$\begin{aligned}k\partial_y d_r(x, y|x', y') &= \mp \pi n/W \quad \text{és} \\ k\partial_{y'} d_r(x, y|x', y') &= \mp \pi m/W',\end{aligned}\quad (3.10)$$

míg az  $r_{nm}^{\pm\pm}$ - integráljaiban ugyanezek a feltételek

$$\begin{aligned}k\partial_y d_r(x, y|x, y') &= \mp \pi n/W \quad \text{és} \\ k\partial_{y'} d_r(x, y|x, y') &= \mp \pi m/W,\end{aligned}\quad (3.11)$$

alakúak. Ha bevezetjük a pályáknak a hullámvezető irányához viszonyított kezdeti  $\phi_{in}$  és végső  $\phi_{fin}$  szögeit, akkor a nyeregpont feltételek éppen azokat a pályákat fogják kiválasztani, melyek kezdő és végszögei eleget tesznek a

$$\sin(\phi_{in}) = \mp \frac{n\pi}{kW} \quad (3.12)$$



ill. a

$$\begin{aligned}\sin(\phi_{fin}) &= \mp \frac{m\pi}{kW'} & t_{nm} \text{ esetén,} \\ \sin(\phi_{fin}) &= \mp \frac{m\pi}{kW} & r_{nm} \text{ esetén,}\end{aligned}\tag{3.13}$$

feltételeknek.

Irregularis hullámvezető alakzatok esetén tipikusan mindig találhatunk olyan klasszikus pályákat, melyek ezeket a nyeregpontra ill. kezdeti és végső beesési feltételeket kielégítik. Az ilyenek azok a rendszerek, melyekben az elektronok klasszikus mozgása kaotikus. Vannak olyan integrálható rendszerek, ahol az adott kezdeti szöggel indított pályák valamilyen megmaradási törvény miatt csak meghatározott végső szöggel érkehetnek a kimeneti hullámvezetőbe. Ilyenkor a második nyeregpontra feltételeket nem lehet kielégíteni. Ilyen rendszerre egy egyszerű példa a 3.1.a, ábrán látható egyenes cső. Vannak olyan rendszerek is, melyekben ez a kétfajta viselkedés keveredik. Bizonyos kezdeti szög tartományokban a kezdeti szög egyértelmű végső szögeket eredményez, míg bizonyos más szögtartományokból indulva tetszőleges végső szögekhez juthatunk. Az ilyen rendszerek fázistere kevert, tartalmaz kaotikus és integrálható tartományokat is. A kaotikus, integrálható és a kevert rendszerek szemiklasszikus vezetési tulajdonságai viszonylag jól ismertek. A 3.1.b, és c, ábrákon látható egyenes oldalakkal határolt rendszerek azonban egyik eddig ismert kategóriába sem sorolhatók be. Ezeket pszeudó integrálhatónak hívják. Ezek nem kaotikusak, és általában nem létezik bármely kezdeti és vég szöget összekötő klasszikus pálya bennük. Egy fix kezdeti szöggel indított klasszikus pályák tipikusan véges sok kimeneti szögre vezetnek. Ebben a tekintetben hasonlóak az integrálható rendszerekhez. Azonban a sarkokon ill. a szennyezőn létrejövő diffrakció szemiklasszikus figyelembevétel esetén a helyzet megváltozik. A diffrakciós pontokat eltaláló klasszikus pályák, a diffrakció geometria elméletének megfelelően tetszőleges irányban távozhatnak a diffrakciós pontokról. Így már általában is lehetséges bármely kezdeti- és végszöget összekötő diffraktív pályát találni, ami egy a kaotikus rendszerekre jellemző tulajdonság.

Az általunk vizsgált rendszereken ezt jól szemléltethetjük. A 3.1.b, és c, ábrákon látható hullámvezetők esetén egy olyan tipikus pálya, amely egy megadott kezdeti szöggel indul a bal oldalon, és nem találja el a diffraktív pontot (a b, ábrán a szennyezőt, a c, ábrán a sarkokat), egy jól meghatározott szöggel távozik a kimeneti jobb oldalon. Visszaverődés klasszikusan nem lehetséges. Visszaverődés csak a klasszikusan null mértékű diffraktív pályák

esetén lehetséges, melyek eltalálják a diffraktív pontokat, és onnan visszafelé indulnak el ismét.

Ezeknek a diffraktív pályáknak a járulékát úgy számíthatjuk ki, ha a Green függvény (2.4) diffraktív részét a (3.9) kifejezésbe behelyettesítjük. Az  $(x, y)$  és a  $(x', y')$  ill. a  $(x, y')$  pontokat a  $(x_0, y_0)$  diffraktív ponton át összekötő pályák hossza

$$\begin{aligned} d(x, y|x', y') &= d(x, y|x_0, y_0) + d(x_0, y_0|x', y'), \text{ és} \\ d(x, y|x, y') &= d(x, y|x_0, y_0) + d(x_0, y_0|x, y') \end{aligned} \quad (3.14)$$

módon a diffraktív pont előtti és utáni részekre bonthatók. Mivel a  $(x_0, y_0)$  diffraktív pont rögzített, a nyeregpont feltételek a diffrakció előtti és utáni szakaszokra függetlenné válnak egymástól: A  $t_{nm}^{\pm\pm}$ -ekre

$$\begin{aligned} k\partial_y d(x, y|x_0, y_0) &= \mp\pi n/W \quad \text{és} \\ k\partial_{y'} d(x_0, y_0|x', y') &= \mp\pi m/W', \end{aligned} \quad (3.15)$$

és az  $r_{nm}^{\pm\pm}$ -ekre

$$\begin{aligned} k\partial_y d(x, y|x_0, y_0) &= \mp\pi n/W \quad \text{és} \\ k\partial_{y'} d(x_0, y_0|x, y') &= \mp\pi m/W. \end{aligned} \quad (3.16)$$

A

$$\begin{aligned} t_{nm}^{\pm\pm} &= \frac{i(k_n k_m')^{1/2}}{\sqrt{WW'}} \int dy dy' e^{i(\frac{\pm n\pi y}{W} \pm \frac{m\pi y'}{W'} - \frac{\nu\pi}{2})} G_0(x, y|x_0, y_0) \mathcal{D}(\phi_{in}, \phi_{out}) G_0(x_0, y_0|x', y'), \\ r_{nm}^{\pm\pm} &= -\frac{i(k_n k_m)^{1/2}}{W} \int dy dy' e^{i(\frac{\pm n\pi y}{W} \pm \frac{m\pi y'}{W} - \frac{\nu\pi}{2})} G_0(x, y|x_0, y_0) \mathcal{D}(\phi_{in}, \phi_{out}) G_0(x_0, y_0|x, y') \end{aligned} \quad (3.17)$$

nyeregpont integrálokat pedig függetlenül lehet elvégezni. A (3.9)-beli Kronecker delta, ahogy általában is, eltűnik az  $y$ -ből  $y'$ -be menő direkt pályák járulékai miatt [Baranger, Stone 1989], [Jalabert, Baranger, Stone 1990], [Baranger, Jalabert, Stone 1993]. Egyenes falakat feltételezve azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} t_{nm}^{\pm\pm} &= -i \frac{(-1)^{nr} \mathcal{D}(\phi_{in}, \phi_{out})}{4\sqrt{WW'} k_n k_m'} e^{ik(d(x, \bar{y}|x_0, y_0) + d(x_0, y_0|x', \bar{y}')) \pm in\pi\bar{y}/W \pm im\pi\bar{y}'/W' - i\nu\pi/2}, \\ r_{nm}^{\pm\pm} &= +i \frac{(-1)^{nr} \mathcal{D}(\phi_{in}, \phi_{out})}{4W\sqrt{k_n k_m}} e^{ik(d(x, \bar{y}|x_0, y_0) + d(x_0, y_0|x, \bar{y}')) \pm in\pi\bar{y}/W \pm im\pi\bar{y}'/W - i\nu\pi/2}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

ahol  $n_r$  az ütközések teljes száma az egyenes falakon,  $\bar{y}$  és  $\bar{y}'$  a (3.15) és (3.16) nyeregpontra egyenletek megoldásai. A  $\pm$  jeleket elhagytuk az  $\bar{y}_\pm$  és a  $\bar{y}'_\pm$  kifejezésekből a rövideg kedvéért.

Az egy diffraktív pontot tartalmazó pálya a legegyszerűbb diffrakciós lehetőség. A komplikáltabb diffraktív pályák többször visszatérnek a diffraktív ponthoz. Ezeket a következő Green függvény írja le:

$$G_d(x, y|x', y') = G_0(x, y|x_0, y_0)G_0(x_0, y_0|x', y') \times \left( \mathcal{D}(\phi_{in}, \phi_{out}) + \sum_r \mathcal{D}(\phi_{in}, \phi_r)G_0^r(\phi_r, \phi_r')\mathcal{D}(\phi_r', \phi_{out}) \right), \quad (3.19)$$

ahol  $\phi_{in}$  és  $\phi_{out}$  jelöli azokat a szögeket, amik alatt a pálya első szakasza eléri ill. az utolsó szakasza elhagyja a diffraktív pontot,  $\phi_r$  és  $\phi_r'$  jelölik azokat a szögeket, amelyek alatt a pálya "hurkai" kezdődnek és végződnek,  $G_0^r(\phi_r, \phi_r')$  pedig a Green függvény eme pályaszakasz mentén a (2.35) ill. (2.31) szerint számított értékét jelöli. A diffraktív ponton kezdődő és végződő pálya hurkok nem mások mint a [Vattay, Wirzba, Rosenqvist 1994]-ban bevezetett diffraktív periodikus pályák és az  $r$  szerinti összegzés az összes lehetséges ilyen pályára vonatkozik. A zárójelben álló kifejezést effektív diffraktív állandónak is nevezhetjük:

$$\tilde{\mathcal{D}}(\phi_{in}, \phi_{out}) = \mathcal{D}(\phi_{in}, \phi_{out}) + \sum_r \mathcal{D}(\phi_{in}, \phi_r)G_0^r(\phi_r, \phi_r')\mathcal{D}(\phi_r', \phi_{out}), \quad (3.20)$$

amivel a transzmissziós és refleksiós mátrix elemek a következő rövid formára hozhatók:

$$t_{nm}^{\pm\pm} = -i \frac{(-1)^{n_r} \tilde{\mathcal{D}}(\phi_{in}, \phi_{out})}{4\sqrt{WW'k_n k_m'}} e^{ik(d(x, \bar{y}|x_0, y_0) + d(x_0, y_0|x', \bar{y}')) \pm in\pi\bar{y}/W \pm im\pi\bar{y}'/W' - i\nu\pi/2},$$

$$r_{nm}^{\pm\pm} = +i \frac{(-1)^{n_r} \tilde{\mathcal{D}}(\phi_{in}, \phi_{out})}{4W\sqrt{k_n k_m}} e^{ik(d(x, \bar{y}|x_0, y_0) + d(x_0, y_0|x', \bar{y}')) \pm in\pi\bar{y}/W \pm im\pi\bar{y}'/W - i\nu\pi/2}. \quad (3.21)$$

Több diffraktív pont  $q_0, \dots, q_k$  esetén a helyzet bonyolultabb. Egy  $y$ -ből induló pálya eljuthat először  $q_l$ -be, majd  $q_s$ -be, végül  $y'$ -be. A direkt pályán túl vannak indirekt pályák  $l$  és  $s$  között, melyek további diffraktív pontok

útbaejtésével érnek el  $l$ -ből  $s$ -be vagy a falakon való pattogásokkal, vagy ezek kombinációjával. Ezeket a pályákat általánosan a

$$G_d(x, y|x', y') = \sum_{l,s} G_0(x, y|x_l, y_l)G_0(x_s, y_s|x', y') \times \left( \sum_r \mathcal{D}(\phi_{y \rightarrow l}, \phi_r)G_0^r(\phi_r, \phi_r')\mathcal{D}(\phi_r', \phi_{s \rightarrow y'}) \right) \quad (3.22)$$

Green függvény veszi figyelembe, ahol  $G_r(\phi_r, \phi_r')$  ismét az  $l$ -et  $\phi$  szög alatt elhagyó ill. az  $s$ -be  $\phi'$  szög alatt érkező pálya mentén számított Green függvény. Bevezetve a

$$\tilde{\mathcal{D}}_{ls}(\phi_{y \rightarrow l}, \phi_{s \rightarrow y'}, k) = \sum_r \mathcal{D}(\phi_{y \rightarrow l}, \phi_r)G_0^r(\phi_r, \phi_r')\mathcal{D}(\phi_r', \phi_{s \rightarrow y'}) \quad (3.23)$$

jelölést, ahol a diagonális tagok ( $\tilde{\mathcal{D}}_{ll}(\phi_{y \rightarrow l}, \phi_{s \rightarrow y'}, k)$ ) a (3.20) egyenletben bevezetett diffrakciós állandók. Végül a transzmissziós és refleksiós mátrix elemek

$$t_{nm}^{\pm\pm} = -i \sum_{ls} \frac{(-1)^{n_{ls}} \tilde{\mathcal{D}}_{ls}(\phi_{in,l}, \phi_{out,s})}{4\sqrt{WW'}k_n k'_m} e^{ik(d(x,\bar{y}|x_l,y_l)+d(x_s,y_s|x',\bar{y}')) \pm \frac{in\pi\bar{y}}{W} \pm \frac{im\pi\bar{y}'}{W'} - \frac{i\nu\pi}{2}},$$

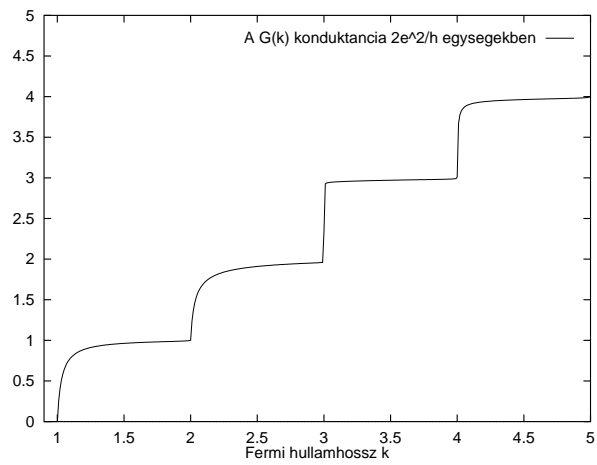
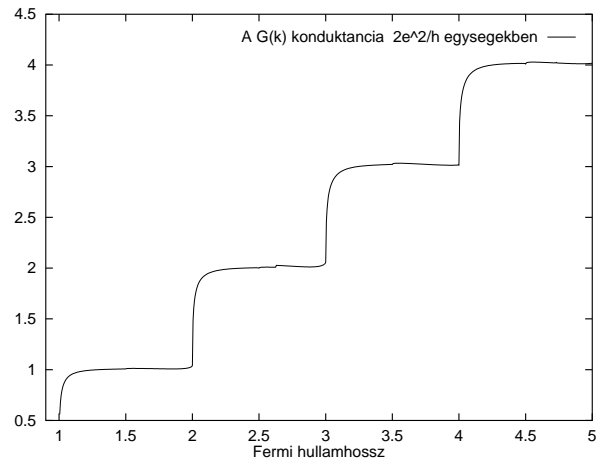
$$r_{nm}^{\pm\pm} = +i \sum_{ls} \frac{(-1)^{n_{ls}} \tilde{\mathcal{D}}_{ls}(\phi_{in,l}, \phi_{out,s})}{4W\sqrt{k_n k'_m}} e^{ik(d(x,\bar{y}|x_l,y_l)+d(x_s,y_s|x',\bar{y}')) \pm \frac{in\pi\bar{y}}{W} \pm i\frac{m\pi\bar{y}'}{W'} - \frac{i\nu\pi}{2}}. \quad (3.24)$$

alakra hozhatók. Ez a kifejezés a transzmissziós és refleksiós mátrix elemek legáltalánosabb kifejezése a diffrakció geometriai elmélete keretei között.

A következő részben néhány mezoszkopikus vezető példán keresztül mutatjuk be a diffraktív pályák néhány hatását.

### 3.4. A diffrakció okozta effektusok

Kiszámítottuk egy végtelen hosszú vezető cső vezetőképességét pontszerű szennyező jelenlétében ill. egy megtört kétdimenziós cső alakú vezetőre (ld. 3.3.ábra). A geometria mindkét esetben olyan, hogy a bal oldalon bejövő elektron a falakon való klasszikus pattogásokkal nem tud visszatérni a bal



3.3. ábra: Vezetés a Fermi hullámszám függvényében  $\frac{\pi}{W}$  egységekben **a**, Végtelen cső egy szennyezővel ( $D = 1$ ). **b**, Megtört cső. A csövek által bezárt szögek  $\pi/6$  és  $\pi/2$ .

oldalra. A szokványos szemiklasszikus elmélet – visszatérő pályák hiányában – azt jósolja, hogy nincs reflexió, és minden  $r_{nm}$  mátrix elem eltűnik. A (3.6) egyenlet szerint az ilyen rendszerek konduktanciájának meg kell egyeznie az ideális kétdimenziós cső  $G(E_F) = \frac{2e^2}{h}N$  vezetőképességével, ahol  $N$  az adott  $E_F$  Fermi energiánál található nyílt csatornák száma. Amint az jól látható a 3.3. ábrán, nem ez a helyzet, az ideális lépcsők némileg le vannak "kopva". Az ideálistól való eltéréseket természetesen a nem zéró reflexió okozza, mely a diffrakció jelenlétére utal.

A pontszerű szennyezés esetén a reflexiót egzaktul meghatározhatjuk és a fellépő tagokat a diffrakció szemszögéből is értékelhetjük. Az egzakt reflexiós mátrix elemek a következő alakúak:

$$r_{nm} = -\Phi_n(y_0)\Phi_m(y_0)\frac{1}{2i\sqrt{k_n k_m}}e^{ik_n|x-x_0|+ik_m|x-x_0|}\frac{\mathcal{D}}{1-\mathcal{D}\tilde{G}_E(x_0, y_0|x_0, y_0)}, \quad (3.25)$$

ahol a tiszta kétdimenziós vezető cső egzakt Green függvénye:

$$G_E(x, y|x', y') = \sum_n \frac{\Phi_n(y)\Phi_n(y')}{2ik_n}e^{ik_n|x-x'|}. \quad (3.26)$$

Ennek értéke a szennyezés helyén kiszámítva divergens sort eredményez, melyet regularizálni kell, ugyanúgy mint ahogy azt az (1.71)-ben tettük ill. a [Cserti, Szálka, Vattay 1998] publikációban tárgyaljuk, a szabad Green függvény levonásával:

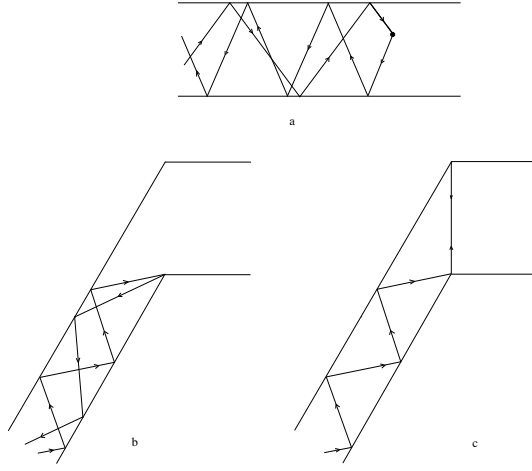
$$\tilde{G}_E(x_0, y_0|x_0, y_0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( G_E(x_0 + \epsilon, y_0|x_0, y_0) + \frac{1}{4}Y_0(k\epsilon) \right), \quad (3.27)$$

ahol  $Y_0(x)$  a Neuman függvény. Felhasználva a (3.7) kifejezést, meghatározhatjuk az egzakt  $r_{nm}^{\pm\pm}$  elemeket:

$$r_{nm}^{\pm\pm} = i\frac{e^{\pm iny_0/W \pm imy_0/W}}{4W\sqrt{k_n k_m}}e^{ik_n|x-x_0|+ik_m|x-x_0|-i\nu\pi/2}\frac{\mathcal{D}}{1-\mathcal{D}\tilde{G}_E(x_0, y_0|x_0, y_0)}. \quad (3.28)$$

A fellépő tagokat interpretálhatjuk úgy is, mint a különböző diffraktív pályák járulékait. Például egy  $(x, \bar{y})$ -ben  $\sin(\phi_{in}) = n\pi/Wk$  szöggel indított pálya a  $(x_0, y_0)$  pontot  $|x-x_0|$  vízszintes és  $|y_0-\bar{y}|+rW$  függőleges irányban megtett út befutása után éri el, ahol  $r$  az ütközések száma a falakon. Az út teljes hossza:

$$d(x, \bar{y}|x_0, y_0) = (|x-x_0|^2 + (|y_0-\bar{y}|+rW)^2)^{1/2},$$



3.4. ábra: Tipikus diffraktív pályák. **a**, Elsődleges pályák, melyek elérik ill. elhagyják a diffraktív pontszerű szennyeződést. **b**, Elsődleges pályák, melyek elérik ill. elhagyják a csúcsot (diffraktív pontot). **c**, Az elsődleges pálya és a diffraktív pontok között oda-vissza pattogó részek.

és

$$\cos(\phi_{in}) = |x - x_0|/d(x, \bar{y}|x_0, y_0), \quad \sin(\phi_{in}) = (|y_0 - \bar{y}| + rW)/d(x, \bar{y}|x_0, y_0).$$

Felhasználva a  $k_n = k \cos(\phi_{in})$  kapcsolatot a (3.28)-ben álló expones az alábbi alakra hozható:

$$k_n|x - x_0| + \frac{n\pi y_0}{W} = kd \cos^2 \phi_{in} + k \sin \phi_{in} (d \sin \phi_{in} - rW + \bar{y}) = kd - rn\pi + \frac{n\pi \bar{y}}{W}.$$

Hasonlóan átírva a (3.28)-ban a másik exponenst is, amely az  $(x_0, y_0)$ -ból kifutó pályát tartalmazza (ld. a 3.4. ábrát), visszakapjuk a (3.21) kifejezést a

$$\tilde{\mathcal{D}} = \frac{\mathcal{D}}{1 - \mathcal{D}\tilde{G}_E(x_0, y_0|x_0, y_0)} \quad (3.29)$$

effektív diffrakciós állandóval. Megnyugtató, hogy ebben az egyszerű esetben a diffrakciós elmélet megegyezik az egzakt eredménnyel.

A regularizált Green függvény szemiklasszikusan felírható olyan pályák összegeként, melyek a diffraktív pontból indulnak, és oda térnek vissza:

$$\tilde{G}_E(q_0, q_0) \approx \sum_{r: q_0 \rightarrow q_0} \frac{(-1)^{n_r}}{\sqrt{8\pi k d_r}} e^{ikd_r - i3\pi/4}. \quad (3.30)$$

Ennek megfelelően a (3.29) effektív diffrakciós állandó geometriai sorrá való átírása után

$$\tilde{\mathcal{D}} = \mathcal{D} + \mathcal{D}^2 \tilde{G}_0(x_0, y_0 | x_0, y_0) + \mathcal{D}^3 \tilde{G}_0^2(x_0, y_0 | x_0, y_0) + \dots \quad (3.31)$$

úgy tekinthető, mint olyan visszatérő pályákra vett összeg, melyek egy, két ... stb. diffrakciót szenvednek útjuk során.

Ebben az egyszerű modellben jól lehet tanulmányozni azt, hogy a diffrakció hogyan koptatja le a konduktancia lépcsőket azoknál a Fermi hullámszámoknál, melyeknél az új csatornák nyílnak  $k \rightarrow \pi n/W$  ( $k_n \rightarrow 0$ ). Ezen Fermi hullámszámok közelében a Green függvény jól közelíthető egyetlen taggal:

$$\tilde{G}_0(q_0, q_0) \approx \frac{\Phi_n(y_0)\Phi_n(y_0)}{2ik_n}. \quad (3.32)$$

A reflexiós mátrixelemek négyzetei pedig ugyanígy közelíthetők a

$$|r_{nm}|^2 = \frac{k_n}{k_m} \frac{|\Phi_m(y_0)|^2}{|\Phi_n(y_0)|^2} \frac{1}{1 + \frac{4k_n^2}{\mathcal{D}^2 |\Phi_n(y_0)|^4}} \quad (3.33)$$

kifejezéssel. A nem-diagonális reflexiós mátrixelemek kicsik, és eltűnnek a  $k_n \rightarrow +0$  határesetben, míg a diagonális tagok Lorentz görbe szerűek  $\Delta_n = \mathcal{D}|\Phi_n(y_0)|^2/2$  szélességekkel:

$$|r_{nn}|^2 = \frac{1}{1 + (k_n/\Delta_n)^2}, \quad k_n > 0. \quad (3.34)$$

Ennek megfelelően a konduktancia lépcsők alakja

$$G \approx \frac{2e^2}{h} (N - |r_{nn}|^2) = \frac{2e^2}{h} \left( N - 1 + \frac{(k_n/\Delta_n)^2}{1 + (k_n/\Delta_n)^2} \right). \quad (3.35)$$

Láthatjuk, hogy a lépcsők lekopásának szélessége arányos a diffrakciós állandóval és a hullámfüggvény négyzetével. Ez a kombináció lényegében a diffrakció erősségét méri, így a lépcsők lekopása elsődleges információt szolgáltat a diffrakció erősségéről.

A diffrakciós elmélet nem egzakt a megtört cső geometria esetén, de a konduktancia kvalitatíve ugyanazt a viselkedést mutatja (3.3. ábra). Itt a fő különbség az, hogy a diffrakciós állandó szögfüggő és így a reflexiós mátrixelemek is bonyolultabbak. A 3.4.b, ábra az elsődleges diffraktív pályákat mutatja. A 3.4.c, ábrán egy olyan pálya látható, ami pattogással éri el az



alsó sarkot, és onnan diffrakcióval éri el a felső sarkot. Amikor  $k$  egy kicsit nagyobb mint  $\pi n/W$ , a kezdeti szög megközelítőleg  $\phi_{in} \approx \pi/2$ , azaz az elektron a falakra majdnem merőlegesen pattog, és nem tudja kizárólag pattogásokkal elérni a felső sarkot. Amikor  $k$  egy kicsit nagyobb, a kezdeti szög csökken, és ilyenkor a pálya már képes pattogásokkal átjutni a cső másik felébe. Ennek a pályának a megjelenése hirtelen változást okoz a reflexióban, ami jól látható a 3.5.b, ábrán  $k = 1.5$ -nél.

Nagy  $k \gg \pi n/W$  Fermi hullámszámok esetén a reflexiós mátrix elemek gyorsan és oszcillálva csökkennek. Az oszcillációk az egyes diffraktív pályák járulékaiból származnak (ld. a 3.5. ábrát.). Ezeket tekintjük át a következő alfejezetben.

### 3.5. Diffraktív periódusok a teljesítmény spektrumban

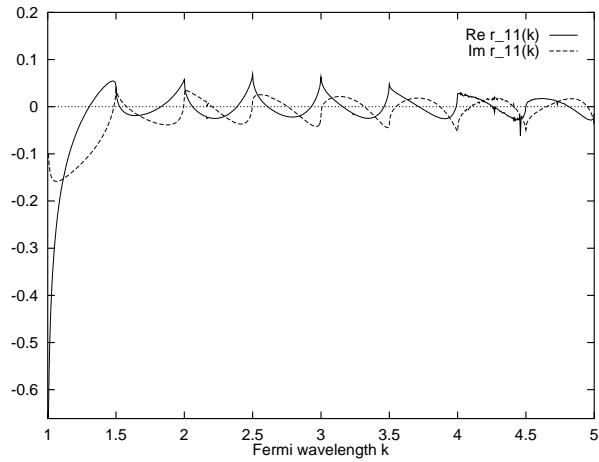
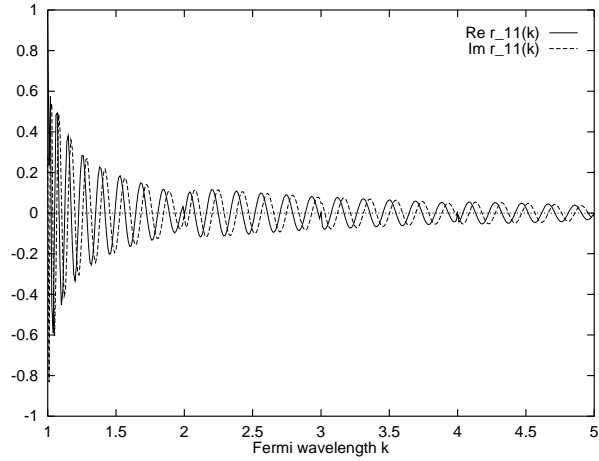
Nagy hullámszámok esetén ( $k \gg \pi n/W$ ) mind  $k_n$  mind  $k_m$  közelíthető  $k$ -val. Az elsődleges diffraktív pályák majdnem párhuzamosak a falakkal ( $\phi \approx 0$ ). A legegyszerűbb pályák azok, amik a diffraktív pontokról egy diffrakciót szenvedve visszaszóródnak. A bonyolultabb pályák pedig azok, amik a diffraktív pont érintése után még többször pattognak a falak között, majd végül egy újabb diffrakció segítségével szóródnak vissza. Mivel a szemiklasszikus Green függvényben minden pályához tartozik egy  $1/\sqrt{k}$ -val arányos prefaktor, a többszörös diffrakciót szenvedő pályák járuléka erősen elnyomódnak. A reflexiós mátrix elemek ebben az esetben jól közelíthetők vezető  $1/k$  rendben az egy ill. két diffrakciót szenvedő pályák járulékaival.

A pontszerű szennyezéses diffrakció esetén az egy és két diffrakciót végző pályák járulékait könnyű megtalálni. Azokat a tagokat kell összegyűjtenünk, melyek a diffrakciós állandó első és második hatványával arányosak:

$$r_{nm} \approx -\Phi_n(y_0)\Phi_m(y_0)\frac{1}{2ik}e^{ik_n|x-x_0|+ik_m|x-x_0|}\left(\mathcal{D} + \mathcal{D}^2\tilde{G}_E(x_0, y_0|x_0, y_0)\right). \quad (3.36)$$

A regularizált Green függvény (3.30) szemiklasszikus alakját beírva végül a

$$r_{nm} \approx -\Phi_n(y_0)\Phi_m(y_0)\frac{1}{2ik}e^{i2k|x-x_0|}\left(\mathcal{D} + \mathcal{D}^2\sum_{q_0 \rightarrow q_0}\frac{(-1)^{n_r}}{\sqrt{8\pi k d_r}}e^{ik d_r(q_0, q_0) - i3\pi/4}\right) \quad (3.37)$$



3.5. ábra: Az  $r_{11}$  reflexiós mátrix elem a Fermi hullámhossz függvényében  $\frac{\pi}{W}$  egységekben mérve **a**, pontszerű szennyeződés **b**, szögben megtört hullámvezető esetén. (  $\text{Re } r_{11}(k)$  ill.  $\text{Im } r_{11}(k)$  folytonos ill. szaggatott vonalakkal van ábrázolva.)

szemiklasszikus elemekhez jutunk. A szennyezőt eltaláló és arról direktben visszaszóródó pályából származó triviális  $e^{i2k|x-x_0|}$  fázis faktoron túl, a legfontosabb oszcillációkat a falak között pattogva még egy a szennyezéstől szennyezésig tartó "hurkokat" leíró pályák adják. Ezeknek a pályáknak a hossza három alkategóriába esik:

$$\begin{aligned} d_r &= 2y_0 + 2Wr, \\ d_r &= 2(W - y_0) + 2Wr, \\ d_r &= 2Wr, \end{aligned} \tag{3.38}$$

ahol  $r = 0, 1, 2, \dots$  a pattogások száma. Az oszcillációk amplitúdója – a szabad Green függvény amplitúdójának megfelelően –  $1/\sqrt{k d_r} \sim 1/\sqrt{r}$ -rel arányos. A megtört cső esetén a szituáció kissé komplikáltabb. Itt a hurkok csak úgy keletkezhetnek, ha a többszörös diffrakció történik a sarkokon, amint azt a 3.3. ábrán láthattuk. Az ilyen visszaverődések kvantummechanikai amplitúdói azonban a sarok diffrakcióból ill. a falról való geometriai visszapattogásból származó járulékok nagyságrendje között helyezkedik el. Ennek megfelelően az ütközések járulékai nem esnek olyan gyorsan, mintha pusztán diffrakcióról volna szó, de gyorsabban esnek a geometria ütközés járulékainál.

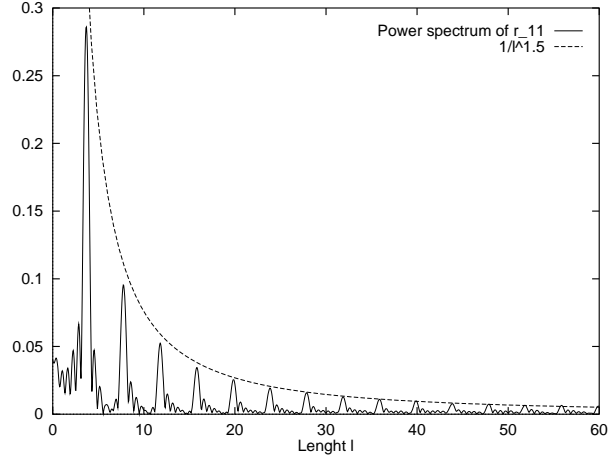
A járulékok viselkedését legegyszerűbben az  $r_{11}$  mátrixelem Fermi hullám-szám szerinti Fourier transzformáltja ill. teljesítmény spektruma segítségével tanulmányozhatjuk. Az egyszerűség kedvéért az

$$\tilde{r}_{11}(l) = \left| \int_{k_0}^{\infty} dk r_{11}(k) e^{-ikl} \right| \tag{3.39}$$

módon bevezetett Fourier transzformált abszolút értékét (ami a teljesítmény spektrum négyzetgyöke) tanulmányozzuk, ahol  $k_0 \approx 2\pi/W$ -nak lett választva. A triviális alap oszcilláció eltávolítása érdekében beszoroztuk az  $r_{11}$ -et a  $e^{i2kL}$  fázis faktorral, ahol  $L$  az alsó sarok és a kezdő vonal távolsága ( $L = |x - x_0|$ ). A 3.6. ábrán láthatjuk, hogy tényleg a feltételezett pálya járuléka a legfontosabb. Az amplitúdók  $\sim 1/r^{3/2}$  szerint esnek, ami gyorsabb mint a geometriai pattogásnál látott  $1/r^{1/2}$ , de lassabb mint a többszörös diffrakciónál tapasztalt  $\sim \mathcal{D}^r$  exponenciális esés.

### 3.6. Összefoglalás

Ebben a fejezetben diffraktív pontokat tartalmazó mezoszkopikus vezetők konduktanciáját tanulmányoztuk. Levezettük a diffraktív periodikus pályák



3.6. ábra: Az  $r_{11}$  mátrix elem Fourier transzformáltjának abszolút értéke a megtört cső esetén. A csúcsok magassága arányos  $l^{-1.5}$ -tel. A csúcsok távolsága megegyezik a megtört cső sarokpontjainak távolságával.

járárlékát a transzmissziós és reflexiós mátrixelemekben, ami a fejezet legjelentősebb eredménye. Megmutattuk, hogy a diffrakció az ideális konduktancia lépcsők lekopását okozza. A diffraktív periodikus pályákat Fourier transzformáció segítségével kimutattuk a reflexiós mátrix elemekben. Pseudo integrálható rendszereket tanulmányozva megállapítottuk, hogy a tanulmányozott pseudo integrálható rendszerben a mátrix elemek esése  $\sim 1/l^\beta$  típusú, ahol  $\beta = 1/2$  a szennyezés esetén, és  $\beta = 3/2$  a sarok diffrakció esetén. Egy hasonló, de tisztán kaotikus vagy rendezetlen rendszerben a szemiklasszikus Green függvény egyes pályákból származó járuléka exponenciálisan esnek. Így a reflexió Fourier analízise alapján eldönthető, hogy kaotikus/rendezetlen vagy pedig pseudo integrálható rendszerrel állunk-e szemben.

Munkánk nyomán a diffraktív periodikus pályákat sikerrel alkalmazták számos mezoszkopikus rendszer vezetési tulajdonságainak leírásában [Argaman 1996], [Riemann et al. 1996], [Smith 1997], [Schwieters, Alford, Delos 1996], [Wirtz et al. 1999], [Jalabert 1999], [Lee, Kim 2000], [Lee, Kim 2001],

[Farajian et al. 1999]. A következő fejezetben pedig a diffraktív periodikus pályák egy nemrégiben talált új mezoszkopikus alkalmazásával, a normál-szupravezető nanostruktúrák leírásával foglalkozunk.



## 4. Fejezet

# Diffrakció mezoszkopikus normál-szupravezető rendszerekben

A mezoszkopikus vezetők új és perspektivikus fajtái a szupravezetőkkel összekapcsolt hibrid nanostruktúrák [Beenakker 1995]. Ezek elméleti leírása új kihívást jelent a szemiklasszikus elmélet számára is. Ezeknek a normál-szupravezető (NS) rendszereknek az érdekességét az adja, hogy bennük fel lép az Andreev reflexió [Andreev 1964] [Beenakker 1997] [Beenakker 1995] [Lambert, Raimondi 1998], melynek során a normál fémekben a közelítőleg Fermi energiával rendelkező vezetési elektronok lyukakként verődnek vissza a normál-szupravezető határfelületről. Az Andreev reflexió alapvetően megváltoztatja a klasszikus pályák szerkezetét. Amint azt láttuk, a szemiklasszikus leírás képes az adott geometria által létrehozott interferencia effektusok feltárására gyengén szennyezett vagy tiszta mezoszkopikus berendezésekben. Ebben a fejezetben az NS rendszerek klasszikus pályáinak szemiklasszikus vizsgálatára az egyik leghatékonyabb eszközt az ún. úthossz spektrumot (Path Length Spektrum, a továbbiakban PLS) fogjuk használni.

A PLS normál rendszerekben a reflexiós (transzmissziós) mátrix elemek Fourier transzformáltjának abszolút érték négyzete:

$$\hat{r}_{mn}(L) = \left| \int_{k_{min}}^{k_{max}} e^{-ik_F L} r_{mn}(k_F) dk_F \right|^2. \quad (4.1)$$

A  $k_{min}$  és a  $k_{max}$  úgy megválasztott alsó és felső határok, hogy az integrálási intervallum legalább néhányszor tíz konduktancia lépcsőnek megfelelő tar-

ományra terjedjen ki. A PLS-nek [Jalabert, Baranger, Stone 1990], [Baranger, Jalabert, Stone 1993], [Ishio, Burgerdörfer 1995], [Wirtz et al. 1997], [Tang, Burgerdörfer 1998], [Schwiesters, Alford, Delos 1996], [Lin, Jensen 1996] csúcsai vannak mindazoknál az  $L$  hosszaknál, amelyekhez olyan klasszikus elektron pálya tartozik, ami a mezoszkopikus vezetőhöz kapcsolt kontaktusokból indul ill. oda tér vissza. A PLS lényegében megegyezik a (3.39)-ben bevezetett mennyiség négyzetével.

Ebben a fejezetben kiterjesztjük a PLS-t szupravezetőt is tartalmazó rendszerekre, és a [Cserti, Vattay, Koltai, Taddei, Lambert 2000] cikk alapján megmutatjuk, hogy az NS rendszerek PLS-e fundamentálisan eltér a normál rendszerekben megszokottól. Konkrétan megmutatjuk, hogy a diffraktív szórócentrumokat is tartalmazó NS rendszerek PLS-ében negatív  $L$ -ek esetén is megfigyelhetők csúcsok, melyek sem a normál, sem a diffrakciót nem tartalmazó NS rendszerekben nem fordulhatnak elő.

## 4.1. PLS a normál rendszerben

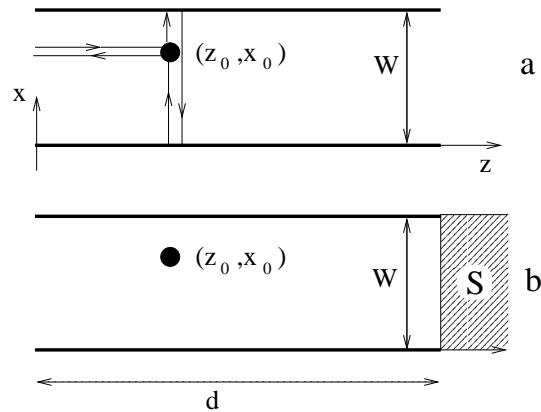
Mielőtt az NS rendszerekkel foglalkoznánk, most részleteiben is megvizsgáljuk az előző szakaszban tárgyalt normál kétdimenziós vezető csőben elhelyezett diffraktív szennyező esetét. A konkrétan vizsgált normál és NS rendszer a 4.1. ábrán látható. Amint azt már megmutattuk, a Fourier transzformált – és így a PLS is – csúcsokat mutat olyan pálya hosszaknál, melyek a bemenő hullámvezetőből indulnak, és oda térnek vissza, és egyszer vagy néhányszor diffraktálódnak a szórócentrumon. A 4.1. ábrán egy ilyen pályát be is mutatunk. Ezek a pályák két részre bonthatók: olyan, a  $z$  tengellyel párhuzamos részre, mely a bemeneti hullámvezetőt és a diffraktív centrumot ill. fordítva köti össze, összesen  $2z_0$  hosszban és többszörös diffrakciós szakaszra, mely a diffraktív centrumon kezdődik és végződik. Ez utóbbit "hurkokra" bonthatjuk, melyek a szórócentrumon kezdődnek és végződnek, és közben a falakon visszaverődnek. A hurkok lehetséges hosszai [Vattay et al. 1997]

$$l_r = \begin{cases} 2Wr \\ 2x_0 + 2Wr \\ 2(W - x_0) + 2Wr \end{cases}, \quad (4.2)$$

ahol  $r = 0, 1, 2, \dots$  a repetíciós szám és  $W$  a kétdimenziós cső szélessége.

A 4.5. ábra az egzakt kvantummechanika szerint kiszámított és a (3.30) felhasználásával készített szemiklasszikus közelítés összehasonlítását mutatja.



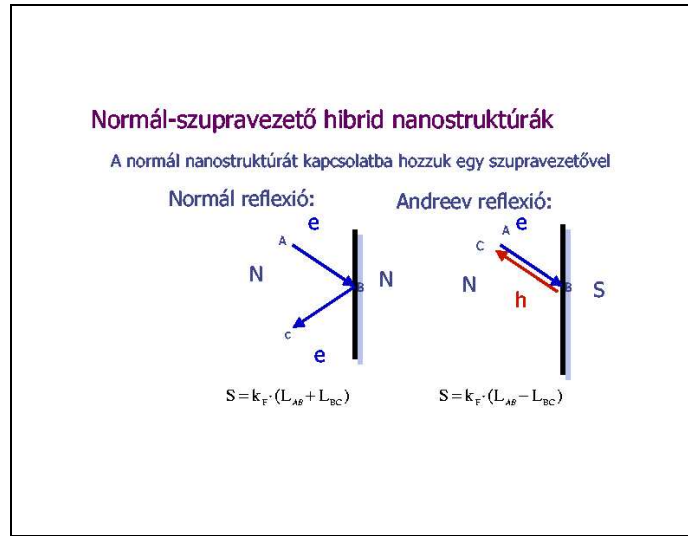


4.1. ábra: Hullámvezető pontszerű diffraktív szóró centrummal **a**, nyitott, és **b**, szupravezetővel lezárt kimenő hullámvezetővel. A  $(z, x)$  koordináta rendszer középpontja a bal alsó sarokban van. Az **a**, esetben egy lehetséges diffraktív pálya is be van rajzolva.

Látható, hogy a szemiklasszikus és a kvantumos eredmény jól egyezik, és a csúcsok a (4.2) hosszak összegeinél ( $+2z_0$ ) vannak. Nyilvánvaló, hogy csúcsok csak pozitív  $L$ -ek esetén fordulnak elő. A csúcsok amplitúdója a többszörös diffrakció során gyorsan csökken, így a legnagyobb csúcsok olyan pályákhoz tartoznak, melyek csak két diffrakciót szenvednek, amint azt az előző fejezetben már láttuk.

## 4.2. PLS az NS rendszerben

Most vizsgáljuk meg, hogy mi történik akkor, ha a kimenő hullámvezetőt normál, vezetőről szupravezetőre cseréljük. Ebben az esetben az  $r_{mn}$  reflexiós amplitúdók kiszámításakor figyelembe kell venni a NS felületen lejátszódó Andreev reflexiót. A Bogoliubov-de Gennes (BdG) egyenletet megoldva egy végtelen NS határfelületre, meg lehet mutatni, hogy az elektron-szerű gerjesztések – beleütközve a szupravezető felületbe – koherens retro-reflexiót szenvednek, és lyukszerű gerjesztésként verődnek vissza. A retro-reflexió azt jelenti, hogy az ütközés után a lyuk sebesség vektora a beeső elektron sebességének megfordítottja lesz ( $\mathbf{v}_{lyuk} = -\mathbf{v}_{elektron}$ ), és (mágneses tér hiányában) az ütközés után a lyuk az elektron pályáján indul el visszafelé.



4.2. ábra: Az Andreev szórás viszonyait bemutató sematikus ábra.

Itt röviden megjegyezzük, hogy a valóságban a helyzet ennél bonyolultabb. Az NS felületen normál elektron szóródás is történik. Az NS felület közelében a BdG egyenletben szereplő párpotenciál a normál oldalon a  $\Delta(\mathbf{r}) = 0$  értéket veszi fel, míg a szupravezető belsejében a  $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta_0 e^{i\phi}$  értéket. A változás nagyon gyorsan, a  $\xi$  szupravezető korrelációs hossz nagyságú tartományban zajlik le, és az ismert [de Gennes 1966] önkonzisztens egyenlet segítségével kell meghatározni. A mezoszkopikus rendszerek esetén azonban a párpotenciál átmeneti tartománya [Beenakker 1997] szerint nem okoz jelentős effektusokat, és a párpotenciált lépcső függvény szerint ugrónak képzelhetjük az NS felületen. Ezt az irodalomban *rigid* határfeltételnek hívják. Alkalmazhatóságának feltételeit [Likharev 1979] vizsgálta részletesen. Ebben a dolgozatban olyan rendszerekkel foglalkozunk csak, ahol a rigid határfeltétel alkalmazható az NS felületen, és az Andreev reflexió ideális módon, tiszta lyuk retro-reflexió formájában történik.

A szemiklasszikus leírásban a  $q'$  és  $q''$  pontokat összekötő hatást az

$$S(q', q'') = \int_{q'}^{q''} p(q) dq \quad (4.3)$$

integrál adja, ahol  $p(q)$  az elektron vagy a lyuk impulzusa a pályája mentén. Mindazok a pályák, amik kapcsolatba kerülnek a szupravezetővel, tartalmaz-

nak elektron és lyuk pálya szakaszokat is. Egy olyan pálya hatása, mely a  $q'$  pontban indul, a  $q^*$  pontban Andreev reflexiót szenved, és az ekkor keletkező lyuk az elektron pályáját időben visszafelé követve visszatér  $q'$ -be, a következő alakba írható:

$$S(q', q') = k_F L(q', q^*) - k_F L(q^*, q') = 0, \quad (4.4)$$

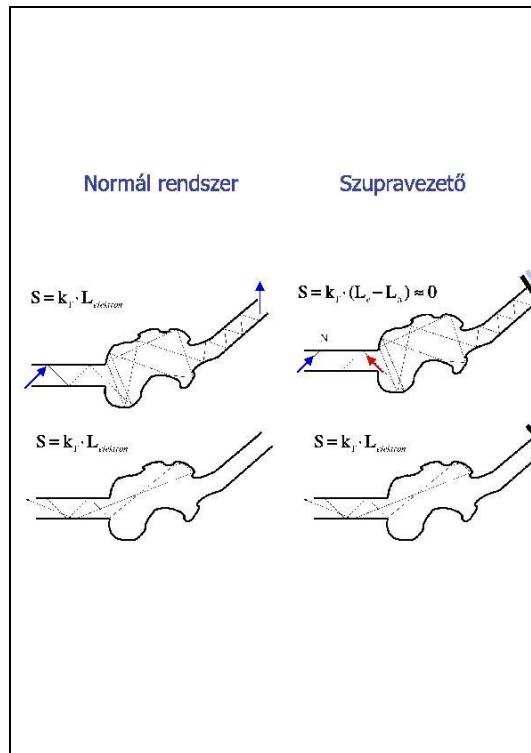
ahol  $L(q', q^*)$  az elektron pálya hossza a kezdeti ponttól az Andreev reflexióig, és  $L(q^*, q')$  a lyuk pálya hossza az Andreev reflexiótól vissza a kezdeti  $q'$  pontig. A negatív előjel a második tag előtt abból ered, hogy a lyuk sebessége és impulzusa ellentétes irányba mutat (ld. a 4.2. ábrát).

Egy olyan mezoszkopikus vezető rendszerben, ahol nem lép fel diffrakció, és nincs jelen mágneses tér, általában is beláthatjuk, hogy az elektron-lyuk pályák – melyek általában is ugyanabban a pontban kezdődnek és végződnek – hatásai mindig pontosan nullák, hiszen az Andreev reflexió után a lyuk az elektron pályát járja be visszafelé. Többszörös Andreev reflexió pedig szemiklasszikusan nem léphet fel. Következésképp, ha a PLS-t kiszámítjuk az elektron-lyuk reflexió mátrixelemeire, abban szemiklasszikusan egy  $L = 0$ -nál koncentrálódó csúcsot találhatunk. Az elektron-elektron reflexióhoz pedig csak olyan normál pályák fognak járulékot adni, melyek nem érintkeznek a szupravezetővel, és nem Andreev reflektálódnak. Ezek klasszikus hatása pedig pozitív lesz (ld. 4.3. ábrát).

Tekintsük most azt az esetet, amikor diffraktív szórás is lehetséges, mint például a 4.1. ábrán látható esetben. A diffrakció mentes esethez képest az újdonság a szemiklasszikus leírásban az, hogy ha elektron vagy lyuk szóródik a diffraktív ponton, akkor ott a klasszikus pálya nincs egyértelműen meghatározva. Így egy olyan lyuk pályája, amely Andreev reflexiókor keletkezett, az elektron pályáján visszafelé haladva a diffraktív ponthoz ér, nem feltétlenül fogja azt a pályát választani, amin az elektron a diffraktív pontba ért, választhat az összes kimenő irány közül. Ezt az effektust Beenakker [Beenakker 1997] vette észre először egy szennyezett NS pont kontaktus esetén. Ennek következtében diffrakció esetén komplikált trajektóriák jöhetnek létre, melyek több elektron és lyuk szakaszt is tartalmazhatnak. A klasszikus hatás ebben az esetben a szakaszok hatásainak összegeként írható:

$$S = \sum k_F(\pm L_i), \quad (4.5)$$

ahol  $L_i$  az  $i$ . szakasz hossza, és a + vagy – előjel aszerint választandó, hogy az adott szakasz elektron- vagy lyuk-szerű-e. A diffrakció mentes esethez

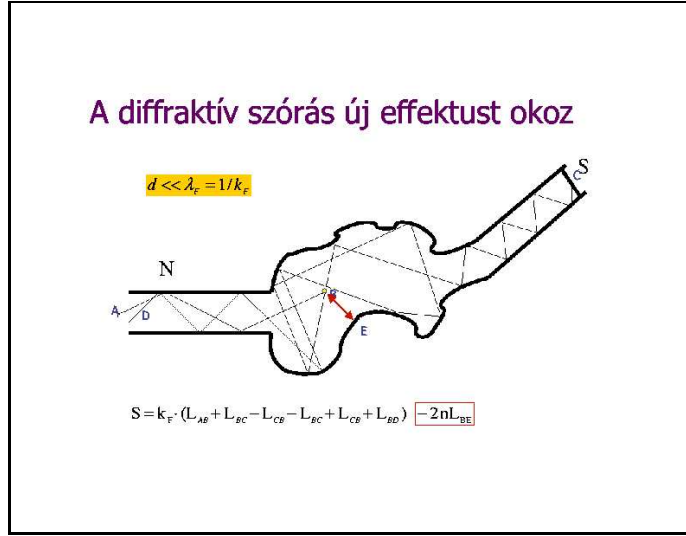


4.3. ábra: Ez a sematikus ábra azt demonstrálja, hogy egy általános alakú NS rendszerben milyen pályák lehetségesek. A normál rendszer átmenő pályái helyett az NS rendszerben elektron-lyuk visszaszóródás következik be úgy, hogy a pálya hatása 0. Az eleve visszaszóródó pályák változatlanul megmaradnak.

képest ez az összeg nem feltétlenül zérus. Sőt a lyukakhoz tartozó hosszak összege lehet nagyobb mint az elektronokhoz tartozó, és így azt várjuk, hogy a PLS-ben negatív hosszaknál is megfigyelhetünk csúcsokat (ld. 4.4).

### 4.3. A PLS kiszámítása az NS rendszerben

A PLS kiszámítása előtt el kell végeznünk a reflexiós mátrix kiszámítását az NS rendszerek esetén. A helyzetet megkönnyíti, hogy a [Beenakker 1997] cikkben explicit összefüggést találtak a szupravezető nélküli normál rend-



4.4. ábra: Ez a sematikus ábra azt demonstrálja, hogy egy általános alakú NS rendszerben hogyan jöhetnek létre negatív hosszúságú pályák a diffraktív szórócentrum következtében.

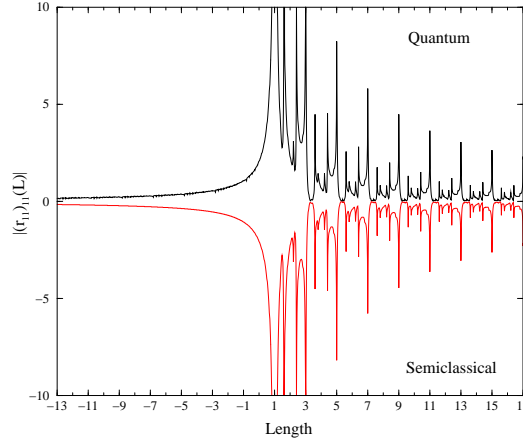
szert transzmissziós és reflexiós amplitúdói és a szupravezető elektron-lyuk és elektron-elektron reflexiós mátrixelemei között. A számításokat itt nem részletezzük, csupán a 4.1.b, ábrán látható diffraktív szórócentrumot tartalmazó rendszer esetére vonatkozó elektron-elektron reflexió mátrixelemeket közöljük:

$$s_{nm}^{e-e}(k_F) = \frac{2r_{nm}(k_F)}{1 + |\mathcal{D}|^2 [\text{Im } G_0(x_0, z_0|x_0, z_0)]^2}, \quad (4.6)$$

ahol  $r_{nm}(k_F)$  a normál rendszer (3.25) reflexiós amplitúdója, és  $G_0(x, z|x', z')$  az üres cső Green függvénye. A  $\mathcal{D} = -i\tilde{\lambda} / [1 - \tilde{\lambda}G_0(x_0, z_0|x_0, z_0)]$  kifejezés pedig az előző fejezetben a normál rendszereknél bevezetett effektív diffrakciós állandó [Cserti, Szálka, Vattay 1998].

A 4.6. ábra felső részében a (4.6) egzakt kvantum eredményből számított PLS látható. Jól látszanak a csúcsok a negatív hosszaknál is, amik a normál rendszerben még nem voltak jelen (összehasonlításul ld. a 4.5. ábrát).

A (4.6) szemiklasszikus megfelelőjét úgy kapjuk, ha a Green függvényt szemiklasszikus alakjával helyettesítjük. A szennyezés helyén kiszámított re-



4.5. ábra: A 4.1. ábrán látható NS rendszer PLS-e. A felső ábrát a kvantum, az alsó tükrözött ábrát a szemiklasszikus számítás után nyert elektron-elektron  $n = 1, m = 1$  reflexiós mátrixelemből a (4.1) definícióval számítva kapjuk. A normál vezető cső szélessége  $W = 1.0$ . a Dirac delta szennyező potenciál erőssége  $\lambda = 10.0$  és a  $(z_0, x_0) = (0.5, 0.7)$  pontba volt helyezve.

gularizált szemiklasszikus Green függvény ismét a szokásos

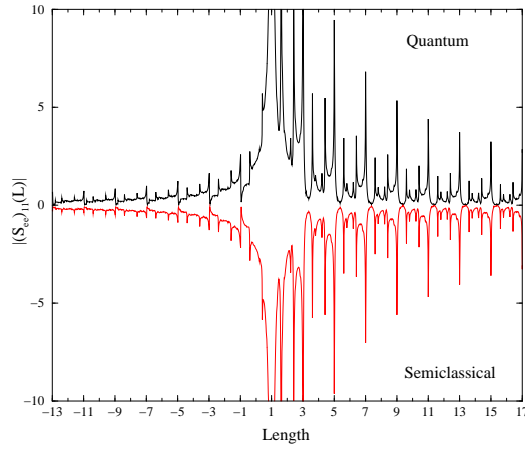
$$G_0(x_0, z_0 | x_0, z_0) = \sum \frac{(-1)^{n_r}}{\sqrt{8\pi k_F l_r}} e^{ik_F l_r - i3\pi/4} \quad (4.7)$$

alakú, ahol az összegzés minden lehetséges  $l_r$  hosszúságú hurokra vonatkozik, melyet (4.2)-ban adtunk meg,  $n_r$  pedig a falon való pattogások száma. Látható, hogy  $\text{Im } G_0(x_0, z_0 | x_0, z_0)$  tartalmazni fogja a (4.7) kifejezés tagjainak komplex konjugáltjait is, és így benne  $e^{\pm ik_F l_r}$  típusú tagok fogna előfordulni. Az  $e^{-ik_F l_r}$  típusú tagok a lyukak által megtett hurkokhoz tartoznak. A (4.6) elektron-elektron reflexiós mátrixelemeket formálisan felfoghatjuk úgy is, mint egy többszörös diffrakciós sor összegét:

$$s_{nm}^{e-e}(k_F) = 2r_{nm}(k_F) \left\{ 1 - |\mathcal{D}|^2 [\text{Im } G_0(x_0, z_0 | x_0, z_0)]^2 + |\mathcal{D}|^4 [\text{Im } G_0(x_0, z_0 | x_0, z_0)]^4 \dots \right\}. \quad (4.8)$$

Kifejezve  $\text{Im } G_0$  hatványait a (4.7) segítségével ill. annak komplex konjugáltjával,  $s_{nm}^{e-e}(k_F)$  felírható oszcilláló összegként:

$$s_{nm}^{e-e}(k_F) = \sum_j A_j e^{iS_j}, \quad (4.9)$$

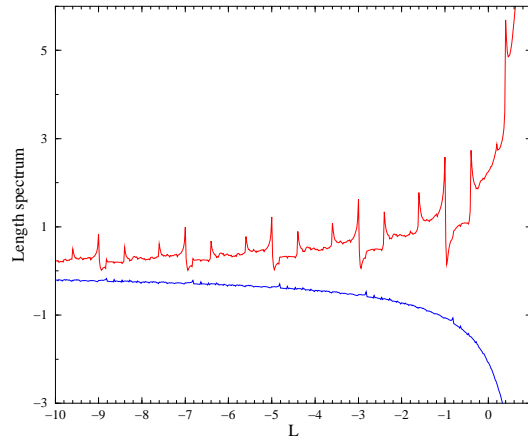


4.6. ábra: Az  $s_{11}^{e-e}(k_F)$  reflexiós amplitúdó PLS-e (ld. a (4.6) egyenletet) a kvantumos (fekete) és szemiklasszikus (piros) számítás eredményeként. A paraméterek ugyanazok, mint a 4.5. ábrán. Jól láthatók a negatív hosszoknál megjelenő csúcsok, amik a negatív hosszúságú pályák jelenlétére utalnak.

ahol  $S_j$  (4.5) alakú. Az  $A_j$  amplitúdókat is kiszámíthatjuk (4.8) alapján, de pontos értékükre nincs szükségünk. A 4.6. ábra alsó felében az itt tárgyalt (4.9) szemiklasszikus közelítés segítségével számított PLS látható. Ismét jó egyezést kapunk a kvantumos eredménnyel. A domináns negatív hosszúsághoz tartozó csúcsok (ld. a 4.7. ábrát) az  $L = 2z_0 - l_r$  családba tartoznak, ahol  $l_r$ -t a (4.2) kifejezés adja meg. Esetünkben  $L = -0.4, -1.0, -1.6, -2.4, -3.0, -3.6, -4.4, -5, \dots$ . Ezek a hosszak a következő útvonalakhoz tartoznak: Először az elektron beleütközik a szupravezetőbe, a retro-reflektálódott lyuk diffraktálódik a szórócentrumon. Ezután  $r$  számú "hurkot" tesz meg a falak között pattogva. Végül a lyuk diffrakcióval visszajut a szupravezetőhöz, és elektronná alakulva visszajut a bejáráshoz.

## 4.4. Összefoglalás

Az ismertett eredmények a normál-szupravezető mezoszkopikus vezetőik PLS-ének első elméleti vizsgálatát adják. Demonstráltuk, hogy a diffraktív NS rendszerek PLS-e fundamentálisan más mint a diffrakció mentes rendszereké a negatív hosszaknál megjelenő csúcsok miatt. A negatív hosszak



4.7. ábra: PLS a normál (alsó rész) és az NS rendszer (felső rész) reflexiós amplitúdóira. A domináns negatív hosszhoz tartozó csúcsok helye  $L = 2z_0 - l_r$ , ahol  $l_r$ -t (4.2) adja meg,. Esetünkben  $L = -0.4, -1.0, -1.6, -2.4, -3.0, -3.6, -4.4, -5, \dots$ .

kimutatása érdekében a legegyszerűbb pontszerű diffraktív szórócentrum esetét vizsgáltuk meg részletesen.

A diffraktív szórás szerepét a normál mezoszkopikus rendszerekben manapság ismerik fel [Jalabert 1999, Hersch, Haggerty, Heller 1999, Sieber 2000, Bogomolny, Leboeuf, Schmit 2000]. Az NS rendszerek egy új játékeret jelenthetnek az ott kialakuló elméletek tesztelésére. A diffrakció szerepe jelentősnek tűnik zárt Andreev NS rendszerek gerjesztési spektrumában is, melynek vizsgálata jelenleg is folyik [Adagideli, Goldbart 2001].



## 5. Fejezet

# A Gutzwiller trace formula kvantum korrekciói

Mint azt a Bevezetőben láttuk, a Gutzwiller trace formula [Gutzwiller 1971], [Gutzwiller 1990] a klasszikusan kaotikus rendszerek szemiklasszikus kvantálásának legtömörebb megfogalmazása. Azonban ez a formula csak a  $\hbar$  szerinti sorfejtés vezető rendje. További  $\hbar$  korrekciók kiszámítására van szükség, ha javítani akarunk a szemiklasszikus kifejezések pontosságán. Ebben a fejezetben [Vattay 1994(1)], [Vattay, Rosenqvist 1996] és [Vattay 1996] alapján azt tekintjük át, hogy hogyan lehet ezeket a korrekciókat kiszámítani és kezelni.

### 5.1. A trace lokális kiszámítása

Amint azt a Bevezetőben már megmutattuk, a Green függvény nyoma formálisan a következő szummával egyezik meg:

$$\text{Tr } G(x, x', E) = \int dx G(x, x, E) = \sum_n \frac{1}{E - E_n}, \quad (5.1)$$

ahol az  $E_n$ -ek az energiaszintek. Ez pedig szintén formálisan a spektráldermináns logaritmikus deriváltja:

$$\text{Tr } G(x, x', E) = \frac{d}{dE} \log \Delta(E), \quad (5.2)$$

ahol  $\Delta(E) = \det(E - \hat{H}) = \prod_n (E - E_n)$  a  $\hat{H}$  Hamilton operátor szekuláris egyenlete. Balian és Bloch [Balian, Bloch 1970] megmutatták, hogy az (1.60)

Green függvény felírható úgy, mint az  $x$  és  $x'$  pontokat  $E$  energiával összekötő összes lehetséges klasszikus pályára vett összeg:

$$G(x, x', E) = \sum_{\substack{j \\ x \rightarrow x'}} A_j(x, x', E) e^{iS_j(x, x', E)/\hbar},$$

ahol  $S_j(x, x', E)$  a pálya mentén számított klasszikus hatás. Az  $A_j(x, x', E)$  amplitúdót pedig egy olyan sor alakjában lehet megadni, melynek első tagja az (1.64) és (1.65)-ben tárgyalt szemiklasszikus kifejezés. (A sor pontos alakjára itt nem lesz szükségünk ezért nem részletezzük. Megtalálható a [Balian, Bloch 1970] cikkben.) A Green függvény nyomának  $\hbar \rightarrow 0$  esetén érvényes aszimptotikus alakját a nyeregpont módszer segítségével számíthatjuk ki. A nyeregpontok az (1.73) szerint a  $p$ -vel jelölt primitív periodikus pályák és azok  $r$ -rel jelölt repetíciói lesznek. Az egyes nyeregpontok járulékait külön-külön úgy kaphatjuk meg, hogy ha a Green függvény nyomát a primitív periodikus pályát körülvevő kis  $\Omega_p$  tartományon számítjuk ki:

$$\text{Tr } G_p(E) = \int_{\Omega_p} d\tau dq_1 dq_2 \dots dq_{d-1} G(\tau, \mathbf{q}, \tau, \mathbf{q}, E), \quad (5.3)$$

ahol bevezettünk egy olyan új koordináta-rendszert, melynek  $\tau$  koordinátája a periodikus pálya mentén fut, míg a  $q_i, i = 1, \dots, d - 1$  koordináták arra merőlegesek. (A koordináták explicit megkonstruálására nem lesz szükségünk.) A periodikus pálya menti  $S_{p,r}(\tau, \mathbf{q}, \tau', \mathbf{q}')$  hatást és  $A_{p,r}(\tau, \mathbf{q}, \tau', \mathbf{q}')$  amplitúdót Taylor sorba fejthetjük a  $q$  és  $q'$  változók szerint a periodikus pálya közelében. A  $\text{Tr } G_p(E)$ -t pedig a lokálisan kifejtett sor segítségével bevezetett

$$G_p(\tau, \mathbf{q}, \tau', \mathbf{q}', E) = \sum_{p,r} A_{p,r}(\tau, \mathbf{q}, \tau', \mathbf{q}', E) e^{iS_{p,r}(\tau, \mathbf{q}, \tau', \mathbf{q}', E)/\hbar}$$

lokális Green függvény nyomaként kapjuk. A teljes Green függvény nyoma a lokális Green függvények nyomainak összegeként adódik:

$$\text{Tr } G(E) = \text{Tr } G_0(E) + \sum_p \text{Tr } G_p(E), \quad (5.4)$$

ahol  $\text{Tr } G_0(E)$  a nulla hosszúságú pályák járuléka (ld. (1.73) és (1.74)). A  $\hbar \rightarrow 0$  határesetben a nyeregpont módszer használata esetén az (5.3) integrálok értéke független az  $\Omega_p$  tubusok méretétől és esetleges átfedésétől.

Eredményeink, ennek megfelelően, mindenképpen csak aszimptotikus sorok lesznek, és csak aszimptotikus értelemben érvényesek. Véges, megadott  $\hbar$  értékek esetén végzett számításoknál gondosan kell eljárni, és olyankor a számításához felhasznált periodikus pályák számát a  $\hbar$ -tól függő módon kell megválasztani. Erre a problémára Berry és Keating [Berry, Keating 1991] javasoltak megoldást. Itt a továbbiakban nem foglalkozunk a sorok kiértékelésével kapcsolatos problémákkal. Ezekre majd a következő fejezetben térünk ki. Most csupán a  $\hbar$  korrekciók technikai értelemben vett kiszámítására összpontosítunk.

## 5.2. A $\hbar$ sorfejtés mint zaj korrekció

Mivel  $G_p$  a lokálisan sorbafejtett Green függvény, feltételezhetjük, hogy van hozzátartozó olyan megfelelő lokális Schrödinger egyenlet, melynek Green függvénye éppen  $G_p$ . Megjegyezzük, nem-kaotikus rendszerek stabil periodikus pályái esetén, Babić és Buldyrev [Babic, Buldyrev 1990] már foglalkoztak a Schrödinger egyenlet lokális megoldásával, és a lokális sajátfüggvényeket kvázi módusoknak nevezték el. Azonban instabil periodikus pályák esetén ilyen megoldások korábban nem voltak ismertek.

Ha meg tudjuk oldani az  $\Omega_p$  tartományon a lokális Schrödinger egyenletet, akkor  $G_p$  nyomát egyszerűen ennek az egyenletnek a sajátértékeire való összegzés segítségével számíthatjuk ki. Másrészt, a lokális Schrödinger egyenlet sajátértékeiből lokális spektráldetermináns ( $Z_p(E)$ ) definiálható, aminek logaritmikus deriváltja éppen a lokális trace formula:

$$\text{Tr } G_p(E) = \frac{d}{dE} \log Z_p(E). \quad (5.5)$$

A lokális Schrödinger probléma definiálásához bevezetünk egy olyan reprezentációt, ami szorosan kapcsolódik a klasszikus dinamikához, és segít abban, hogy egy periodikus pálya környezetében sorbafejthessük a Schrödinger egyenletet [Schulman 1989]. Tekintsük a Hamilton-Jacobi egyenlet egy tetszőleges megoldását:

$$\partial_t S(x, t) + \frac{1}{2} (\nabla S(x, t))^2 + U(x) = 0, \quad (5.6)$$

és transzformáljuk a  $\psi(x, t)$  hullám függvényt ennek segítségével a következő unitér módon  $\varphi(x, t) = \psi(x, t)e^{-iS(x, t)/\hbar}$ . Az így definiált új függvény kielégíti

a Maslov-Fjedoriuk transzport egyenletet [Maslov, Fjedoriuk 1981]:

$$\partial_t \varphi + \nabla(\varphi \nabla S) - \frac{1}{2} \varphi \Delta S - \frac{i\hbar}{2} \Delta \varphi = 0. \quad (5.7)$$

A kvantummechanikai propagátor ebben a reprezentációban

$$\mathcal{K}(x', t' | x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(S(x, t) - S(x', t'))} \mathcal{L}(x', t' | x, t) \quad (5.8)$$

alakú, ahol  $\mathcal{L}(x', t' | x, t)$  az (5.7) transzport egyenlet propagátora.

Az (5.7) egyenlet formálisan egy olyan stochasztikus dinamikai rendszer sűrűségeloszlását fejlesztő Fokker-Planck egyenlet, melynek komplex Langevin egyenlete:

$$\frac{d\xi}{dt'} = \nabla S(\xi, t') + \sqrt{i\hbar} \eta(t'), \quad (5.9)$$

és  $\eta(t')$  a Gauss fehér zaj a szokásos  $\langle \eta_i(t) \rangle = 0$  és  $\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = \delta_{ij} \delta(t - t')$  tulajdonságokkal. Az (5.7) egyenletben még szerepel egy a  $\Delta S(x, t)$ -sel arányos forrás tag is. A Fokker-Planck [Haken 1978] analógiát kihasználva ezt a propagátort úgy is felírhatjuk, mint egy a klasszikus pálya körül fluktuáló stochasztikus pályákra vett összeget :

$$\mathcal{L}(x', t' | x, t) = \left\langle e^{\frac{1}{2} \int_t^{t'} \Delta S(\xi(t''), t, x) dt''} \delta(x' - \xi(t', t, x)) \right\rangle_\eta \quad (5.10)$$

ahol  $\xi(t', t, x)$  a komplex Langevin egyenlet megoldásai  $\xi(t) = x$  kezdeti feltétellel. A  $\langle \rangle_\eta$  minden zaj konfigurációra való átlagolást jelöl. Ezt a Hamilton-Jacobi egyenlet tetszőleges megoldásán alapuló reprezentációt Roncadelli vezette be [Roncadelli 1992], mint a Feynman féle pálya összeg [Feynman 1948, Schulman 1981] egy alternatíváját. A  $\hbar \rightarrow 0$  határesetben a fluktuációk elnyomódnak, és a (5.9) egyenlet determinisztikussá válik,  $\xi(t', t, x)$  pedig egy olyan klasszikus pálya lesz, melynek kezdeti feltételei  $x$  és  $p(t) = \nabla S(x, t)$ . A propagátor kiszámítására a gyakorlatban egy perturbációs sorfejtését dolgozhatunk ki, amiben a  $-\frac{i\hbar}{2} \Delta \varphi$  tagot perturbációnak tekintjük az (5.7) egyenlet többi, determinisztikus dinamikához tartozó tagjához képest. A sorfejtés a következő alakú lesz:

$$\mathcal{L}(x', t' | x, t) = \mathcal{L}^{(0)}(x', t' | x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} (i\hbar/2)^n \mathcal{L}^{(n)}(x', t' | x, t), \quad (5.11)$$

ahol

$$\mathcal{L}^{(0)}(x', t' | x, t) = e^{\frac{1}{2} \int_t^{t'} \Delta S(\xi(t''), t, x) dt''} \delta(x' - \xi(t', t, x)), \quad (5.12)$$

de most  $\xi(t', t, x)$  a determinisztikus pályát jelöli. A sorfejtés  $n = 0$  tagja visszaadja a szemiklasszikus közelítést, a további  $(i\hbar)^n$ -nel arányos tagok pedig a szemiklasszikus közelítés kvantum korrekciói. Látható, hogy ebben a felfogásban a kvantum korrekciók mint a determinisztikus klasszikus mechanika zaj korrekciói jelennek meg.

### 5.3. Sorfejtés a periodikus pályák környezetében

Ezek után már egyszerűen vizsgálhatjuk az egyes periodikus pályák környezetéből származó járulékokat. Az (5.8) propagátort a legmegfelelőbbben úgy használhatjuk az  $\Omega_p$  tubusban, ha a Hamilton-Jacobi egyenlet  $S_p(x, t)$  megoldását úgy választjuk meg, hogy a  $p(t) = \nabla S_p(x_p(t), t)$  periodikus pálya menti impulzus éppen megegyezzen a periodikus pálya  $p_p(t)$  klasszikus impulzusával, és a  $\nabla S_p(x, t)$  sebességtér legyen idő független. Ezt a sebességteret egy Taylor sor alakjában meg is konstruálhatjuk, ha az

$$S_p(x, t) = \sum_{\mathbf{n}} s_{\mathbf{n}}(t)(x - x_p(t))^{\mathbf{n}}/\mathbf{n}! \quad (5.13)$$

kifejtést behelyettesítjük az (5.6) Hamilton-Jacobi egyenletbe, ahol  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, \dots, n_d)$  egy vektor indexet jelöl,  $d$  a dimenzió,  $\mathbf{n}! = \prod_{i=1}^d n_i!$  és  $(x - x_p(t))^{\mathbf{n}} = \prod_{i=1}^d (x_i - x_{p,i}(t))^{n_i}$ . Az sebességtér idő függetlenségét úgy biztosíthatjuk, ha az együtthatókat periodikusnak választjuk ( $s_{\mathbf{n}}(t) = s_{\mathbf{n}}(t + T_p)$ ), a nulladik rend kivételével, amely időben növekvő:

$$s_0(t + T_p) - s_0(t) = \int_0^{T_p} \left( \frac{1}{2} p_p^2(t') - U(x_p(t')) \right) dt' = \int_0^{T_p} L(t') dt'.$$

(A nulladrendű tag nem lép fel a sebességtérben a  $\nabla S_p(x, t)$  gradiens képzés miatt.) Ez a megoldás egyben stacionárius is ( $\partial_t S_p(x, t) = -E$ ), hiszen a Hamilton-Jacobi egyenlet csak ekkor ad időfüggetlen sebességteret.

### 5.4. Lokális sajátértékek

A konstrukció során bármely rendnél megállva formálisan periodikus sebességteret kapunk, ezért célszerűbb a folytonos időfejlődés helyett a  $T_p$  periódusra vonatkozó  $\mathcal{K}_p(x', T_p|x, 0)$  operátort vizsgálni, ahol  $p$ -vel azt jelezzük,

hogy az operátort a fenti procedúra során  $S_p(x, t)$  segítségével állítottuk elő. Az operátor birtokában rátérhetünk a lokális sajátértékek és sajátfüggvények kiszámítására.

Ha  $\psi_p(x, t)$  a lokális probléma stacionárius állapota, akkor egyben az egy periódusra vonatkozó operátornak is sajátfüggvénye a megfelelő sajátértékkel:

$$e^{-iET_p/\hbar}\psi_p(x, 0) = \int dx' \mathcal{K}_p(x', T_p|x, 0)\psi_p(x', 0). \quad (5.14)$$

Kihasználva, hogy  $S_p(x, T_p) - S_p(x, 0) = \int_0^{T_p} dt' L(t')$ , és hogy a periodikus pályák hatására igaz, hogy  $S_p(E) = \oint \mathbf{p}_p \cdot d\mathbf{q} = \int_0^{T_p} L(t') dt' + ET_p$ , a következő transzformált sajátfüggvényt kapjuk:

$$\varphi_p(x, 0) = e^{iS_p(E)/\hbar} \int dx' \mathcal{L}_p(x, T_p|x', 0)\varphi_p(x', 0). \quad (5.15)$$

Amennyiben  $e^{\lambda_{p,\mathbf{m}}(E)}$ -val jelöljük  $\mathcal{L}_p$  sajátértékeit, melyek kielégítik az

$$e^{\lambda_{p,\mathbf{m}}(E)}\varphi_{p,\mathbf{m}}(x, 0) = \int dx' \mathcal{L}_p(x, T_p|x', 0)\varphi_{p,\mathbf{m}}(x', 0) \quad (5.16)$$

egyenleteket, ahol  $\mathbf{m}$  a sajátértékek vektor indexe, akkor velük a lokális spektráldetermináns a

$$Z_p(E) = \prod_{\mathbf{m}} (1 - e^{\lambda_{p,\mathbf{m}}(E)} e^{\frac{i}{\hbar} S_p(E)}) \quad (5.17)$$

alakba írható. Az (5.2), (5.4) és (5.5) egyenletek alapján újra kifejezve a teljes rendszer spektráldeterminánsát, azt kapjuk hogy

$$Z(E) = \prod_p \prod_{\mathbf{m}} (1 - e^{\lambda_{p,\mathbf{m}}(E)} e^{\frac{i}{\hbar} S_p(E)}). \quad (5.18)$$

Ez a kifejezés a teljes spektráldeterminánst a lokális sajátértékek szerinti végtelen szorzat alakjában fejezi ki, és ez a fejezet egyik legfontosabb eredménye. Az (5.18) kifejezés a szemiklasszikus spektráldetermináns [Voros 1988] kvantum korrekciókkal általánosított alakjának tekinthető. Hasonló formulát vezetett be [Voros 1994] az ún. Quantum Baker Map esetén. Definiálhatjuk a

$$\zeta_{\mathbf{m}}^{-1}(E) = \prod_p (1 - e^{\lambda_{p,\mathbf{m}}(E)} e^{\frac{i}{\hbar} S_p(E)}) \quad (5.19)$$

függvényeket, melyek az (1.7) Gutzwiller-Voros zeta függvények kvantum korrekcióval ellátott változatai. Az (5.2) logaritmusos derivált elvégzése után a Gutzwiller trace formula kvantumos korrekciók figyelembevételével vett általánosítását kapjuk:

$$\mathrm{Tr}(G(E) - G_0(E)) = \frac{1}{i\hbar} \sum_{p,r,\mathbf{m}} \left[ T_p(E) - i\hbar \frac{d\lambda_{p,\mathbf{m}}(E)}{dE} \right] \left( e^{\lambda_{p,\mathbf{m}}(E)} e^{\frac{i}{\hbar} S_p(E)} \right)^r. \quad (5.20)$$

## 5.5. A korrekciók kiszámítása

A gyakorlatban az (5.16) sajátértékeket a következő módon határozhatjuk meg: Behelyettesítjük a  $\varphi_{p,\mathbf{m}}(x, t) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^\ell \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(\ell)}(x, t)$  perturbációs sort az (5.7) egyenletbe, és így egy iteratíván megoldható egyenlet sémát kapunk, ami a  $\varphi_{p,\mathbf{m}}^{(0)}$  szemiklasszikus megoldással kezdődik:

$$\begin{aligned} \partial_t \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(0)} + \nabla \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(0)} \nabla S_p + \frac{1}{2} \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(0)} \Delta S_p &= 0, \\ \partial_t \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(\ell+1)} + \nabla \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(\ell+1)} \nabla S_p + \frac{1}{2} \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(\ell+1)} \Delta S_p &= \Delta \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(\ell)}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

A sajátértékeket szintén sorbafejthetjük az  $i\hbar/2$  hatványai szerint:

$$\lambda_{p,\mathbf{m}}(E) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^\ell C_{p,\mathbf{m}}^{(\ell)}. \quad (5.22)$$

A  $\hbar$  szerint sorbafejtett (5.16) sajátérték egyenlet pedig a következő:

$$\begin{aligned} \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(0)}(x, T_p) &= \exp(C_{p,\mathbf{m}}^{(0)}) \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(0)}(x, 0), \\ \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(1)}(x, T_p) &= \exp(C_{p,\mathbf{m}}^{(0)}) \{ \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(1)}(x, 0) + C_{p,\mathbf{m}}^{(1)} \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(0)}(x, 0) \}, \\ \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(2)}(t + T_p) &= \exp(C_{p,\mathbf{m}}^{(0)}) [ \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(2)}(t) + C_{p,\mathbf{m}}^{(1)} \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(1)}(t) + (C_{p,\mathbf{m}}^{(2)} + \frac{1}{2} (C_{p,\mathbf{m}}^{(1)})^2) \varphi_{p,\mathbf{m}}^{(0)}(t) ], \end{aligned} \quad (5.23)$$

és így tovább. A  $\varphi_{p,\mathbf{m}}^{(\ell)}(x, t)$  függvényeket (5.13)-hoz hasonló módon Taylor sorba fejthetjük a periodikus pályák körül, és rekurzíván megoldhatjuk az

(5.22) egyenleteket. Az első korrekció meghatározásához csak néhány együtt-hatót kell kiszámítani. A nulladik rend a szemiklasszikus Gutzwiller trace formulával ekvivalens:

$$C_{p,\mathbf{m}}^{(0)} = -i\pi\nu_p/2 - \sum_{i=1}^{d-1} \left(m_i + \frac{1}{2}\right) u_{p,i},$$

ahol az  $u_{p,i} = \log |\Lambda_{p,i}|$ -k a  $\mathbf{J}_p$  Jacobi mátrix  $\Lambda_{p,i}$  sajátértékeinek logaritmusai, és  $\nu_p$  a periodikus pálya Maslov indexe. Az első kvantum korrekciót pedig a  $C_{p,\mathbf{m}}^{(1)} = \int_0^{T_p} dt \Delta\varphi_{p,\mathbf{m}}^{(0)}(t)/\varphi_{p,\mathbf{m}}^{(0)}(t)$  integrál adja.

A szemiklasszikus Gutzwiller trace formulát úgy nyerjük, ha a nulladik rendben nyert eredmény logaritmikus deriválása során csak a vezető rendet hagyjuk meg, a magasabb rendű  $-i\hbar \frac{d}{dE} \lambda_{p,\mathbf{m}}(E)$  tagot pedig nem, mivel az a következő rendhez ad járulékot. Majd a nulladrendű szemiklasszikus sajátértékeket felhasználva:

$$e^{\lambda_{p,\mathbf{m}}^{(0)}(E)} = e^{C_{p,\mathbf{m}}^{(0)}} = e^{-i\nu_p\pi - \sum_i (m_i + 1/2) u_{p,i}}.$$

Az  $m_i$  indexekre való összegzés végül a várt

$$\sum_{\mathbf{m}} e^{\lambda_{p,\mathbf{m}}^{(0)}(E)r} = \frac{e^{-ir\nu_p\pi/2}}{|\det(\mathbf{1} - \mathbf{J}_p^r)|^{1/2}} \quad (5.24)$$

eredményt adja (v.ö. (1.74)).

## 5.6. Az eredmények tesztelése a három diszk rendszeren

Az eredményeket célszerű olyan rendszereken tesztelni, ahol azok összevethetők más módon nyert eredményekkel. Jelenleg ez csak a két és három diszk rendszer esetén tehető meg, melyekre [Gaspard, Alonso 1993]-ban vezettek le korrekciókat a Feynman pálya integrál direkt kiértékelésével.

Ha általános elméletünket biliárd rendszerekre akarjuk alkalmazni, akkor figyelembe kell venni, hogy a falakon a lokális hullámfüggvényeknek is ki kell elégíteniük a Dirichlet határfeltételeket. Az (5.7)-ből meghatározott sajátfüggvény nem folytonos azokban a pontokban, ahol az  $x_p(t)$  pálya beleütökzik



a falba. A hullámfüggvény alakja az ütközést közvetlenül megelőző  $t_{-0}$  időpontban:

$$\psi_{in}(x, y(x), t) = \varphi(x, y(x), t_{-0})e^{iS(x, y(x), t_{-0})/\hbar}, \quad (5.25)$$

ahol  $y(x) = Y_2x^2/2! + Y_3x^3/3! + Y_4x^4/4! + \dots$  a biliárd falának parametrikus alakja Descartes koordinátákban az ütközés pontja (origo) körül. A hullámfüggvény alakja az ütközést közvetlenül követő  $t_{+0}$  időpontban:

$$\psi_{out}(x, y(x), t) = \varphi(x, y(x), t_{+0})e^{iS(x, y(x), t_{+0})/\hbar}. \quad (5.26)$$

A két hullámfüggvény összegének el kell tűnnie a falon. Ennek az a következménye, hogy a be és kimenő fázisok és amplitúdók között az  $S(x, y(x), t_{-0}) = S(x, y(x), t_{+0})$  és a  $\varphi(x, y(x), t_{-0}) = -\varphi(x, y(x), t_{+0})$  kapcsolatoknak fenn kell állniuk. A fellépő negatív előjel nem más, mint a kemény falon való ütközés következtében fellépő Maslov fázis.

A három diszk rezonanciák szemiklasszikus közelítésből származó értékeinek a kvantum korrekciókból származó javulását demonstrálandó, egy numerikus módszert dolgoztunk ki az első  $C_{p,m}^{(1)}$  kvantum korrekciók számítására tetszőleges kétdimenziós biliárd rendszerben. Az első korrekció csak olyan alap adatoktól függ mint az ütközések közti szabad utak hossza, a beesési szögek és  $Y_2, Y_3, Y_4$  a fal Taylor sorfejtésének három első tagja a beesési pontban. Mivel a Feynman integrálból a három diszk rendszerben a [Alonso, Gaspard 1993], ill. a [Gaspard, Alonso 1993] cikkekben csak a  $C_{p,0}^{(1)}$  korrekciókat számították ki, mi is csupán erre szorítkozunk. A számítások öt tizedesjegyig egyezést találtak, de módszerünkkel a számítógép numerikus pontosságáig képesek voltunk a korrekciókat kiszámítani. Számításaink rávilágítottak néhány apróbb hibára is, melyet ennek nyomán Gaspard és Alonso később erratumban korrigáltak [Alonso, Gaspard 1994]. Az  $m \neq 0$  együtthatókat nem tudtuk összevetni a [Alonso, Gaspard 1993] cikk eredményeivel, mert az  $m$  függést a szerzők nem vették észre az általános (5.18) és (5.19) kifejezések hiányában. Másrészt, módszerünk szempontjából nem okoz nehézséget az ütközések számának növekedése. Így képesek voltunk 10 ütközésig kiszámítani a 226 primitív pálya járulékait. Ezt csak a számítógép numerikus pontosságának elérése limitálta.

Azonban az  $m$  függés is ellenőrizhető a két diszk [Wirzba 1992] rendszer esetén. A szokásos  $R : a = 6 : 1$  esetben [Gaspard, Rice 1989], [Cvitanović, Eckhardt 1989] módszerünkkel az analitikus  $C_{p,m}^{(1)} = (-0.625m^3 - 0.3125m^2 + 1.4375m + 0.625)/\sqrt{2E}$  eredményt kaptuk. Az  $m = 0$  és  $m = 1$  esetekben

Kvantum	Szemiklasszikus	+Első korrekció	$\delta_{SC}/\delta_{Corr}$
0.697995	0.758313	0.585150	0.53
2.239601	2.274278	2.222930	2.08
3.762686	3.787876	3.756594	4.13
5.275666	5.296067	5.272627	6.71
6.776066	6.793636	6.774061	8.76
...	...	...	...
30.24130	30.24555	30.24125	92.3
31.72739	31.73148	31.72734	83.8
32.30110	32.30391	32.30095	20.0
33.21053	33.21446	33.21048	79.4
33.85222	33.85493	33.85211	25.2
34.69157	34.69534	34.69152	77.0

5.1. táblázat: A három diszk rezonanciák valós része ( $Rek$ ) 6:1 diszk szeparációnál. A szemiklasszikus közelítés hibáját  $\delta_{SC} = |Rek_{QM} - Rek_{SC}|$  jelöli,  $\delta_{Corr}$  pedig ugyanez az első korrekciót is tartalmazó szemiklasszikus közelítésre vonatkoztatva. Az utolsó oszlopban szereplő arányszám megmutatja, hogy hányadrésére csökken a szemiklasszikus hiba az első korrekció figyelembevételétől [Vattay, Rosenqvist 1996].

ezt Wirzba [Wirzba] is megerősítette, aki numerikus kvantumos számítások segítségével jutott ugyanerre az eredményre. Ugyanezt találta Whelan a [Whelan 1995] cikkében egy konfokális hiperbola rendszerben. Módszerünk további előnye, hogy szimmetriával rendelkező rendszerek esetén a kvantum korrekciók is felbonthatók a szimmetria osztályok szerint.

Az 5.1. táblázat a szemiklasszikus (Gutzwiller) és az első kvantum korrekcióval javított szemiklasszikus eredményt hasonlítja össze a három diszk rezonanciák esetén. Azt láthatjuk, hogy az első korrekció egyre nagyobb százalékos javulást okoz a hullámszám növelésével. A növekvő pontosság mellett gyors konvergenciát is meg lehet figyelni, aminek oka az, hogy számításainkat a szimmetria redukált rendszerben tudtuk elvégezni, ellentétben a teljes tartományban végzett [Alonso, Gaspard 1993] számításokkal.

## 5.7. Összefoglalás

Ebben a fejezetben új módszert vezetünk be a szemiklasszikus Gutzwiller trace formulában fellépő klasszikus periodikus pályákból származó tagok  $\hbar$  korrekcióinak kiszámítására. A módszer a korrekciók kiszámítását visszavezeti egy zajjal perturbált dinamikai rendszer zaj korrekcióinak problémájára. A korrekciók konkrét kiszámítására perturbatív módszert adtunk. Eredményeinket a három diszk rendszeren teszteltük, és összevetettük más módon kapott hasonló eredményekkel. Demonstráltuk az új módszer számos előnyét, melyek közül a legfontosabb, hogy a korábbi módszerektől eltérően, helyesen adja vissza trace formula korrekcióinak szerkezetét.

A  $\hbar$  korrekciók számítása az elért eredmények ellenére is nehéz numerikus feladat főként a fellépő differenciálegyenletek rossz matematikai tulajdonságai miatt. Ezért, a magasabb rendű  $\hbar$  korrekciók tanulmányozása helyett, a hozzájuk nagyon sokban hasonló zaj korrekciókat tanulmányozzuk a következő fejezetben, melyek technikailag sokkal könnyebben kezelhetők, remélve, hogy a zaj korrekciók esetén elért eredmények hasznosak lehetnek a magasabb rendű  $\hbar$  korrekciók viselkedésének megértésében is.



## 6. Fejezet

# Kaotikus rendszerek zaj korrekciói

Az előző fejezetben láttuk, hogy a szemiklasszikus trace formula  $\hbar$  korrekcióinak kiszámítása meglehetősen komplikált feladat, és az csak az első néhány korrekció meghatározása tűnik reális célkitűzésnek. Másrészt megmutattuk, hogy a korrekciók számítása matematikailag hasonló, mint egy zajjal perturbált dinamikai rendszer zaj korrekcióinak számítása. Ezért itt egyszerűbb rendszert választunk a trace formula korrekcióinak tanulmányozására, a diszkrét, zajjal perturbált leképezéseket. A diszkrét leképezések egyszerűen definiálhatók és technikailag könnyen kezelhetők, ugyanakkor viselkedésük magukban hordozza ugyanazt a komplexitást, mint a folytonos dinamikájú kaotikus rendszerek. Ha egy determinisztikus leképezést gyenge zajjal perturbálva sztochasztikussá teszünk, akkor az evolúciós operátorának trace formulájában a zaj erősségét jellemző paraméter hatványaival arányos korrekciók jelennek meg. Ezek hasonlóak a szemiklasszikus trace formula  $\hbar$  korrekcióihoz. Ebben a fejezetben a [Cvitanović, Dettman, Mainieri, Vattay 1998], [Cvitanović, Hansen, Rolf, Vattay 1998], [Cvitanović, Dettman, Mainieri, Vattay 1999], [Sondergaard, Palla, Vattay, Voros 2000], [Palla, Vattay, Voros 2000], [Palla, Vattay, Voros, Sondergaard, Dettmann 2001] publikációk alapján bemutatjuk a trace formula zaj korrekcióinak viselkedését.

## 6.1. Egydimenziós leképezések trace formulája

A diszkrét, determinisztikus leképezések a legegyszerűbb dinamikai rendszerek, melyeken a káosz tulajdonságai tanulmányozhatók. Számos időben eredendően folytonos folyamat vagy rendszer analízise is vezethet diszkrét leképezések vizsgálatára. Jó példa erre a folytonos dinamikájú kaotikus rendszerek Poincaré metszete. A szokásos mechanikai rendszerek egydimenzióban mind integrálhatók, ezzel szemben diszkrét leképezésekkel már egydimenzióban is könnyen létrehozhatunk kaotikus rendszert. Általánosan az

$$x_{n+1} = f(x_n) \quad (6.1)$$

egyenlettel definiálhatunk egy ilyen leképezést, ahol  $f(x)$  egy valós függvény.

Ha az egyes trajektóriák nyomon követése helyett inkább a pontok sűrűségének fejlődésére vagyunk kíváncsiak, akkor a leképezés evolúciós operátorát, (Perron-Frobenius operátor) kell vizsgálnunk, ugyanis egy  $\phi(x)$  sűrűséggel elosztott kezdőpontok halmaza egy lépés alatt a

$$\phi'(y) = (\mathcal{L} \circ \phi_n)(y) = \int dx \mathcal{L}(y, x) \phi(x) \quad (6.2)$$

sűrűségfüggvényű ponthalmazba képződik le, ahol  $\mathcal{L}$  a fent említett operátor. Determinisztikus leképezés esetén  $\mathcal{L}$  egyszerűen az

$$\mathcal{L}(y, x) = \delta(y - f(x)) \quad (6.3)$$

formulával adható meg, hiszen ilyenkor

$$\phi_{n+1}(y) = \int dx \delta(y - f(x)) \phi_n(x). \quad (6.4)$$

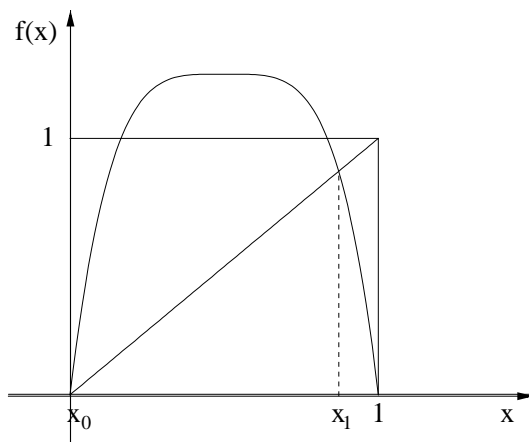
Az evolúciós operátor  $\mathcal{L}^n$  hatványainak nyoma megadható egy olyan összefüggéssel, mely a diszkrét leképezések trace formulájának tekinthető, és analóg a Gutzwiller-féle trace formulával:

$$\text{Tr} \mathcal{L}^n = \int dx \delta(x - f^n(x)) = \sum_{l, x_l^* = f^n(x_l^*)} \frac{1}{|1 - (f^n)'(x_l^*)|}, \quad (6.5)$$

$$(6.6)$$

ahol az  $n$  hosszúságú periodikus pályákra kell összegezni. Az  $f^n$  deriváltja, a láncszabály miatt nem más, mint az  $f'(x)$  függvénynek a pálya mentén vett szorzata:

$$(f^n)'(x_l^*) = f'(x_l^0) f'(x_l^1) \dots f'(x_l^n). \quad (6.7)$$



6.1. ábra: Az általunk használt leképezés. Az  $x_0$  és  $x_1$  pontok a leképezés fixpontjai.

Ha a periodikus pálya egy  $n_p$  periódusú primitív pálya  $r$ -szeres repetíciója, ( $n = rn_p$ ), akkor az egyszeres körüljárás után kapott  $(f^{n_p})' = \Lambda_p$  hatványozódik, és  $(f^{rn_p})'(x_l^*) = \Lambda_p^r$ . A (6.7) kifejezés egyben a vizsgált pálya stabilitása is, hiszen a pálya kezdeti pontjától egy infinitezimális  $\eta$ -val eltérő pontból indítván a leképezést, egy körüljárás alatt:

$$f^n(x_l^* + \eta) = f^n(x_l^*) + (f^n)'(x_l^*)\eta + \mathcal{O}(\eta^2) \quad (6.8)$$

lesz a képpont koordinátája, amiből definíció szerint az  $\eta$  együtthatója adja a pálya stabilitását.

A (6.5) átírható egy olyan formulába, ahol csak a primitív periodikus pályákra kell összegezni, ugyanis minden  $n_p$  periódusú primitív pálya a ciklikus szimmetria miatt  $n_p$ -szer fordul elő az összegzésben:

$$\text{Tr} \mathcal{L}^n = \sum_{n=rn_p} \frac{n_p}{|1 - \Lambda_p^r|}. \quad (6.9)$$

Ha egy leképezés bizonyos pontokat az értelmezési tartományán kívülre képez, akkor hasonlít az eddig tanulmányozott olyan nyílt kaotikus szóró rendszerekhez, mint például a három diszk rendszer. Egy ilyen leképezés képe látható a 6.1. ábrán. Sok különböző kezdeti értékről indítva a leképezést, lépésről lépésre egyre kevesebb pont marad bent az intervallumban. Sok

lépés után csak a periodikus pályákhoz kellően közeli kezdeti feltételekhez tartozó pályák maradnak, mert a periodikus pályák sosem hagyhatják el a rendszert. Egy  $n$  hosszúságú periodikus pálya definíció szerint teljesíti a következő egyenleteket:

$$x_{i+1} = f(x_i), \quad (6.10)$$

$$x_{n+1} = x_1. \quad (6.11)$$

A legegyszerűbb (legrövidebb) periodikus pályák a fixpontok, melyeket a 6.1. ábrán is feltüntettünk.

Tipikusan  $e^{-\gamma n}$  a valószínűsége annak, hogy egy részecske  $n$  iteráció után is a rendszerben marad, ahol  $\gamma$  az ún. szökési ráta. Az evolúciós operátor legnagyobb sajátértéke és ezen szökési ráta közt a 1.1.4 részben, a folytonos idejű esetre már ismertetett, szoros összefüggés van. Ennek diszkrét idejű megfelelője

$$\gamma = \ln(\nu_0), \quad (6.12)$$

ahol  $\nu_0$  most a Perron-Frobenius operátor legnagyobb sajátértéke. Itt érdemes megjegyezni, hogy a szökési ráta és a Perron-Frobenius operátor közötti fenti kapcsolat kimutatása Szépfalusy Péter és Tél Tamás nevéhez fűződik [Tél 1987] [Szépfalusy, Tél 1986]. A Perron-Frobenius operátor spektruma is megadható a rendszer periodikus pályáin alapuló kifejtés segítségével. Az operátor spektráldeterminánsa a

$$\det(1 - z\mathcal{L}) = 0 \quad (6.13)$$

alakba írható, ahol  $z$  az operátor sajátértékeinek reciproka. A

$$\det(1 - z\mathcal{L}) = \exp(\text{Tr} \log(1 - z\mathcal{L})) \quad (6.14)$$

azonosság és a

$$\log(1 - x) = - \sum_n \frac{1}{n} x^n \quad (6.15)$$

sorfejtés felhasználásával a spektráldeterminánsra a következő összefüggést nyerjük:

$$\det(1 - z\mathcal{L}) = \exp \left( - \sum_n \frac{z^n}{n} \text{Tr} \mathcal{L}^n \right). \quad (6.16)$$



A (6.9) formula behelyettesítésével ez a

$$\det(1 - z\mathcal{L}) = \exp\left(-\sum_{p,r} \frac{z^{rn_p}}{r} \frac{1}{|1 - \Lambda_p^r|}\right) \quad (6.17)$$

alakot ölti. A folytonos esethez hasonlóan a spektráldetermináns kummuláns sorfejtése

$$\det(1 - z\mathcal{L}) = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} Q_n z^n \quad (6.18)$$

alakú, ahol a  $Q_n$  kummulánsokat a Newton rekurziós formula állítja elő az operátor hatványainak nyomából:

$$Q_n = \frac{1}{n} (C_n - C_{n-1}Q_1 - \cdots - C_1Q_{n-1}), \quad C_n = \text{Tr}\mathcal{L}^n. \quad (6.19)$$

Az ebben a fejezetben megadott konkrét számításokat a  $[0, 1]$  intervallumon értelmeztük,

$$f(x) = 20 \left( \frac{1}{16} - \left( \frac{1}{2} - x \right)^4 \right) \quad (6.20)$$

függvénnyel definiált leképezésen teszteltük. A fenti függvény a 6.1. ábrán látható. A 6.1. ábráról leolvasható, hogy minden olyan pontban, melynek képe még nem szóródik ki a rendszerből, az  $|f'(x)| > 1$ , ami azt jelenti, hogy rendszerünk hiperbolikusan tágító, azaz a trajektóriák lokálisan exponenciálisan távolodnak egymástól.

## 6.2. Zajos leképezések evolúciós operátorai

Az eddig ismertett determinisztikus leképezésekből zajos leképezést kapunk, ha minden iteráció után az eredményhez egy véletlen értéket (zajt) adunk:

$$x_{n+1} = f(x_n) + \sigma \xi_n, \quad (6.21)$$

ahol  $f(x)$  a leképezés determinisztikus részét megadó függvény,  $\sigma$  a zaj erősségét jellemző paraméter,  $\xi_n$  pedig egy véletlen valószínűségi változó, melynek szórása egyre normált, és sűrűségfüggvényét  $p(\xi)$ -vel fogjuk jelölni.

Az irodalomban leggyakrabban használt, és általunk is vizsgált eset a Gauss zaj:

$$p(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad (6.22)$$

melyet esetünkben még a  $\hbar$  korrekciókkal való analógia is motivál. A továbbiakban feltesszük, hogy a  $\xi_n$ -ek nem korreláltak. A zaj jelenléte miatt a (6.4) egyenlet, mely egy ponthalmaz kezdeti sűrűségfüggvényének egy lépésben történő megváltozását adja meg, kiegészül még egy  $\xi$  szerinti integrálással

$$\phi_{n+1}(y) = \int dx \int d\xi \delta(y - f(x) - \sigma\xi) p(\xi) \phi_n(x). \quad (6.23)$$

Innen leolvashatjuk, hogy zaj jelenlétében a Perron-Frobenius operátor a (6.3)-tól eltérően az

$$\mathcal{L}(y, x) = \int d\xi \delta(y - f(x) - \sigma\xi) p(\xi) = \frac{1}{\sigma} p\left(\frac{y - f(x)}{\sigma}\right) \quad (6.24)$$

alakot veszi fel. Az egyenlet jobb oldalán álló függvénynek mint sűrűségfüggvénynek a szórása  $\sigma$ -val egyenlő, ezért a zajerősség paramétert szokás zajszélesség paraméternek is hívni. A (6.24) egyenletből látszik, hogy a  $\sigma \rightarrow 0$  gyenge zaj határesetben a sztochasztikus trajektóriák a determinisztikus  $x' = f(x)$  trajektóriák köré koncentrálnak. Innen természetesen adódik, hogy az operátor kifejezhető a  $\sigma$  zajszélesség paraméter hatványai szerint haladó Taylor-sorba:

$$\mathcal{L}(x', x) = \delta(x' - f(x)) + \sum_{N=2}^{\infty} \frac{(-\sigma)^N}{N!} \delta^{(N)}(x' - f(x)) \int \xi^N p(\xi) d\xi, \quad (6.25)$$

ahol  $\delta^{(N)}(y) = \frac{\partial^N}{\partial y^N} \delta(y)$ . Ezzel egy olyan, a determinisztikus trajektóriákra koncentrált kifejtését kaptuk az evolúciós operátornak, melynél a zajszélesség paraméterben magasabb rendű tagokat a delta-függvény deriváltjai adják a zaj sűrűségfüggvényének  $a_n = \int p(\xi) \xi^n d\xi$  momentumaival súlyozva:

$$\mathcal{L}(x', x) = \delta(x' - f(x)) + \sum_{N=2}^{\infty} \frac{(-\sigma)^N}{N!} a_n \delta^{(N)}(x' - f(x)). \quad (6.26)$$

A Gauss-függvény összes momentuma jól ismert; segítségével az evolúciós operátor a következő alakot veszi fel:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(x', x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(x'-f(x))^2/2\sigma^2} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\sigma^{2N}}{N!2^N} \delta^{(2N)}(x' - f(x)) \quad (6.27) \\ &= \delta(x' - f(x)) + \frac{\sigma^2}{2} \delta^{(2)}(x' - f(x)) + \frac{\sigma^4}{8} \delta^{(4)}(x' - f(x)) + \dots\end{aligned}$$

### 6.3. Az evolúciós operátor mátrix reprezentációja

A szökési rátához a  $\sigma^2$  rendű korrekciót egzaktul meg tudtuk határozni egy Feynman-féle gráf technikán alapuló eljárás segítségével [Cvitanović, Dettman, Mainieri, Vattay 1998], illetve eljutottunk a  $\sigma^4$  rendű korrekcióhoz a gráf technika egy optimálisabb alkalmazásával [Cvitanović, Dettmann, Mainieri, Vattay 1999]. Ebben az alfejezetben bemutatunk egy olyan effektív módszert, melynek segítségével a  $\sigma^8$  rendű korrekciókat is ki lehet számítani  $\text{Tr}\mathcal{L}^n$ -hez, illetve a kumuláns sorfejtésen keresztül magához a szökési rátát megadó legnagyobb sajátértékhez. A módszer lényege, hogy a Perron-Frobenius operátort egy olyan mátrix reprezentációban írjuk fel, mely végtelen dimenziós ugyan, de a véges méretűre való csonkolással kellő mátrix méret elérése után már exponenciálisan kis hibát ejtünk. A mátrixok megkonstruálása után a nyom kiszámítása már egy egyszerű feladat.

Az  $f(x)$  leképezésünk hiperbolikusan tágító, ezért egy kezdeti  $\phi(x)$  sűrűségeloszlásra az evolúciós operátor simító hatással van. Így feltehetjük, hogy a  $\phi(x)$  analitikus, és ezért helyettesíthető a Taylor-sorával. Idővel az  $\mathcal{L}$  evolúciós operátor kisimítja a kiindulásul vett eloszlás apró részleteit, ami ahhoz vezet, hogy a Taylor-sort az első néhány vezető rendű tagja dominálja.

Egy  $g(x)$  analitikus függvény Taylor-sora a következő alakban írható fel :

$$g(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{x^m}{m!} g_m, \quad (6.28)$$

ahol a  $g_m$  együtthatókat a

$$g_m = \left. \frac{\partial^m}{\partial y^m} g(x) \right|_{x=0} \quad (6.29)$$

összefüggés adja meg, amit úgy is megfogalmazhatunk, hogy az  $\frac{x^m}{m!}$  függvények által kifeszített bázis duális bázisát a  $\frac{\partial^m}{\partial x^m}$  operátorok adják. Így H.H. Rugh [Rugh 1992] nyomán az operátor mátrix reprezentációját úgy definiáljuk, hogy először hattatjuk az operátort a  $\frac{x^m}{m!}$  bázisfüggvényre, majd az eredményt deriváljuk  $m'$ -ször a nulla helyen:

$$(\mathbf{L})_{m'm} = \frac{\partial^{m'}}{\partial y^{m'}} \int dx \mathcal{L}(y, x) \frac{x^m}{m!} \Big|_{y=0}, \quad m, m' = 0, 1, 2, \dots \quad (6.30)$$

Az  $\mathbf{L}$  tehát az  $\mathcal{L}$  operátor mátrix reprezentációja, mely a trajektóriák kezdeti  $\phi_n(x)$  sűrűségének  $x^m$  komponensét a  $\phi_{n+1}(y)$  sűrűségfüggvény  $y^{m'}$  komponensére vetíti. A kívánt nyomot így már a mátrix reprezentációban felírt  $\mathbf{L}$  nyomaként is meg lehet adni:

$$\text{Tr} \mathcal{L}^n = \text{Tr} \mathbf{L}^n. \quad (6.31)$$

Az  $\mathbf{L}$  végtelen dimenziós, ezért a konkrét számításoknál véges méretűre kell csonkolni. Hiperbolikusan tágító leképezések esetén  $\mathbf{L}$  szerkezete olyan, hogy viszonylag kis méretűre való csonkolása is nagyon pontos spektrumot ad. Következő feladatunk az  $\mathbf{L}$  mátrix elemeinek kiszámítása.

### 6.3.1. Az evolúciós operátor lokális mátrix reprezentációja

A (6.26) egyenlet alapján az evolúciós operátor hatványának nyoma is kifejtethető mint a  $\sigma$  hatványaival haladó Taylor-sor, melyben  $\delta^{(N)}(f(x_a) - x_{a+1})$  típusú tagok szerepelnek. Az ilyen tagok közül csak azok adnak nem nulla járulékot, melyeknél az  $x_1, x_2, \dots, x_n, x_{n+1} = x_1$  sorozat egy periodikus pályája az  $f(x)$  függvénnyel megadott determinisztikus leképezésnek. Ezért a  $\text{Tr} \mathcal{L}^n$  Taylor-sorához minden  $n$  hosszúságú periodikus pálya pontjai adnak járulékot, tehát a determinisztikus rendszer vázának tekinthető periodikus pályák alapvető fontosságúak a gyenge zajjal perturbált rendszerek leírásában is. Ahhoz, hogy megadjuk egy periodikus pálya járulékát, legegyszerűbb, ha a periodikus pálya minden  $x_a$  pontjához bevezetünk egy, a ponttól mért  $\Phi_a$  koordinátát, és definiáljuk a lokális leképezést a kérdéses pont koordináta rendszeréből az iteráció során öt követő  $x_{a+1}$  pont környezetébe:

$$x_a \rightarrow x_a + \Phi_a, \quad a = 1, \dots, n_p \quad (6.32)$$

$$f_a(\Phi) = f(x_a + \Phi) \quad (6.33)$$

$$\mathcal{L}_a(\Phi_{a+1}, \Phi_a) = \mathcal{L}(x_{a+1} + \Phi_{a+1}, x_a + \Phi_a). \quad (6.34)$$

Az  $\mathcal{L}_a$  operátor gyenge zaj esetén érvényes sorfejtését a (6.26) egyenlet mintájára egy periodikus pálya környezetében a következő alakban adhatjuk meg:

$$\mathcal{L}_a(\Phi', \Phi) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-\sigma)^N}{N!} a_N \delta^{(N)}(\Phi' + x_{a+1} - f_a(\Phi)). \quad (6.35)$$

Hasonlóan az (6.30) egyenlet levezetéséhez, megkonstruálhatjuk a determinisztikus rendszer egy periodikus pályájának  $x_a$  és  $x_{a+1}$  pontjaira koncentrált  $\mathcal{L}_a$  operátor lokális mátrix reprezentációját:

$$\begin{aligned} (\mathbf{L}a)_{m'm} &= \frac{\partial^{m'}}{\partial \Phi'^{m'}} \int d\Phi \mathcal{L}_a(\Phi', \Phi) \frac{\Phi^m}{m!} \Big|_{\Phi'=0} \\ &= \sum_{N=\max(m-m', 0)}^{\infty} \frac{(-\sigma)^N}{N!} a_N (\mathbf{B}a)_{m'+N, m}. \end{aligned} \quad (6.36)$$

A  $\mathbf{B}$  kifejezhető az  $f_a(\Phi)$  inverzének deriváltjaival:

$$\begin{aligned} (\mathbf{B}a)_{m'm} &= \frac{\partial^{m'}}{\partial \Phi'^{m'}} \int d\Phi \delta(\Phi' + x_{a+1} - f_a(\Phi)) \frac{\Phi^m}{m!} \Big|_{\Phi'=0} \\ &= \frac{\partial^{m'}}{\partial \Phi'^{m'}} \frac{(f_a^{-1}(x_{a+1} + \Phi') - x_a)^m}{m! |f'_a(f_a^{-1}(x_{a+1} + \Phi'))|} \Big|_{\Phi'=0} \\ &= \frac{\text{sign}(f'_a)}{(m+1)!} \frac{\partial^{m'+1}(\mathcal{F}_a(\Phi')^{m+1})}{\partial \Phi'^{m'+1}} \Big|_{\Phi'=0}, \end{aligned} \quad (6.37)$$

ahol a rövidség kedvéért bevezettük az  $\mathcal{F}_a(\Phi') = f_a^{-1}(x_{a+1} + \Phi') - x_a$  jelölést. Ha  $\mathcal{F}_a(\Phi')$ -t Taylor-sorba fejtjük, a konstans tag nulla, hisz  $f_a^{-1}(x_{a+1}) = x_a$ . Ezért a következőképpen írhatjuk:

$$\mathcal{F}_a(\Phi') = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\mathcal{F}_a^{(l)}}{l!} \Phi'^l, \quad (6.38)$$

ahol  $1/\mathcal{F}_a^{(1)} = f'_a$ . A mátrixelemeket explicite meg lehet adni a multinomiális kifejtés segítségével [Abramowitz, Stegun 1972]:

$$\left( \sum_{l=1}^{\infty} \frac{x_l}{l!} t^l \right)^m = m! \sum_{l=m}^{\infty} \frac{t^l}{l!} \cdot \sum (l|a_1, \dots, a_n)' x_1^{a_1} \dots x_n^{a_n}, \quad (6.39)$$

ahol a második ( $\sum$ ) összegzés minden olyan nem negatív egészen fut végig, melyek teljesítik a következő feltételeket:

$$a_1 + 2a_2 + \dots + la_l = l, \quad a_1 + a_2 + \dots + a_n = m, \quad (6.40)$$

és a multinomiális együttható:

$$(l|a_1, a_2, \dots, a_n)' = \frac{l!}{(1!)^{a_1} a_1! (2!)^{a_2} a_2! \dots (l!)^{a_l} a_l!}. \quad (6.41)$$

Alkalmazzuk a (6.39) formulát  $\mathcal{F}_a(\Phi')$ -re  $m + 1$ -es hatvánnyal:

$$\frac{(\mathcal{F}_a(\Phi'))^{m+1}}{(m+1)!} = \sum_{l=m+1}^{\infty} \frac{\Phi'^n}{n!} \sum (l|a_1, a_2, \dots, a_l)' (\mathcal{F}_a^{(1)})^{a_1} (\mathcal{F}_a^{(2)})^{a_2} \dots (\mathcal{F}_a^{(l)})^{a_l}. \quad (6.42)$$

Ennek a kifejezésnek az  $(n + 1)$ -edik deriváltjában a  $\Phi' = 0$  helyen csak az első  $l = n + 1$  tag nem nulla, ezért a mátrixelemek nullával egyenlők, ha  $n < m$ , így  $\mathbf{B}$  egy alsó háromszög mátrix:

$$(\mathbf{B}a)_{m'm} = \sum (m' + 1|a_1, a_2, \dots, a_{m'+1})' \cdot (\mathcal{F}_a^{(1)})^{a_1} (\mathcal{F}_a^{(2)})^{a_2} \dots (\mathcal{F}_a^{(m'+1)})^{a_{m'+1}}. \quad (6.43)$$

A diagonális és az első nem diagonális mátrix elemeket könnyű kiszámítani, az első négy a következő alakú:

$$(\mathbf{B}a)_{mm} = \frac{1}{|f'_a| f_a^m}, \quad (6.44)$$

$$(\mathbf{B}a)_{m+1,m} = -\frac{1}{2} \frac{(m+2)!}{m!} \frac{f''_a}{|f'_a| f_a^{m+2}}, \quad (6.45)$$

$$(\mathbf{B}a)_{m+2,m} = -\frac{(m+3)!}{24m! |f'_a| f_a^m} \left( \frac{f'''_a}{f_a^3} - 3(m+4) \frac{(f''_a)^2}{f_a^4} \right), \quad (6.46)$$

$$(\mathbf{B}a)_{m+3,m} = -\frac{(m+4)!}{48m!} |f'_a| f_a^m \left( 2 \frac{f''''_a}{f_a^4} - 4(m+5) \frac{f''_a f'''_a}{f_a^5} + (m+5)(m+6) \frac{f''^3_a}{f_a^6} \right), \quad (6.47)$$

$\vdots$

ahol  $f'_a, f''_a, \dots$  az  $f(x)$  deriváltját jelölik az  $x_a$  pontban.

Leképezésünk hiperbolikusan tágító,  $|f'_a| > 1$ , ezért a diagonális elemek exponenciálisan csökkennek, (úgy mint  $1/|f'_a|^{m+1}$ ), és a nem diagonális elemek még még gyorsabban. Ez igazolja, hogy  $\mathbf{B}a$  véges méretűre csonkolásával exponenciálisan kicsi hibát okozunk.

A lokális mátrix reprezentációban az evolúciós operátor nyomát az alábbi módon lehet közelíteni :

$$\mathrm{Tr}\mathcal{L}^n|_{\text{saddles}} = \sum_p n_p \sum_{r=1}^{\infty} \delta_{n,n_p r} \mathrm{Tr}\mathbf{L}p^r = \sum_{N=0}^{\infty} C_{n,N} \sigma^N, \quad (6.48)$$

ahol  $\mathrm{Tr}\mathbf{L}p = \mathrm{Tr}\mathbf{L}_{n_p} \mathbf{L}_2 \cdots \mathbf{L}_1$  a  $p$  pálya járuléka; a  $\sigma^N$  szerinti hatványsor pedig a (6.37) egyenletből származik, mely kifejezi az  $\mathbf{L}a$  mátrixokat a  $\mathbf{B}a$  mátrixok segítségével. A "saddles" alsó index arra emlékeztet, hogy ezek az eredmények a  $\mathrm{Tr}\mathcal{L}^n$  nyeregpont közelítéséből származnak, és aszimptotikus sorként érvényesek a gyenge zaj határesetben.

A fenti formuláknak egy egyszerű ellenőrzéseként vizsgáljuk meg, hogy mit kapunk zajmentes esetben. Ilyenkor az  $(\mathbf{L}a)_{m'm} = (\mathbf{B}a)_{m'm}$  mátrixok a determinisztikus  $\mathcal{L}|_{\sigma=0}$  Perron-Frobenius operátort reprezentálják. Az  $\mathbf{L}a$ -k most háromszög mátrixok, melyeknek a diagonális elemei  $(\mathbf{L}a)_{mm} = \frac{1}{|f'_a| |f_a^m|}$ . Az  $\mathcal{L}$  nyoma egy  $p$  periodikus pályán így:

$$\mathrm{Tr}\mathbf{L}p = \mathrm{Tr}\mathbf{L}_{n_p} \mathbf{L}_2 \cdots \mathbf{L}_1 = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{|\Lambda_p| \Lambda_p^m} = \frac{1}{|1 - \Lambda_p|}, \quad (6.49)$$

tehát visszakaptuk a (6.9) determinisztikus trace formulát:

$$\mathrm{Tr}\mathcal{L}^n = \sum_p n_p \sum_{r=1}^{\infty} \delta_{n,n_p r} \frac{1}{|1 - \Lambda_p^r|}. \quad (6.50)$$

### 6.3.2. A sajátértékek perturbatív korrekciói

A (6.13) spektráldetermináns a zajos esetben a zajszélesség paramétertől is függ:

$$F(\sigma, \nu(\sigma) = \det(1 - \mathcal{L}/\nu(\sigma)) = 0. \quad (6.51)$$

Ez egy implicit egyenlet a  $\nu = \nu(\sigma)$  sajátértékre nézve, így ha egy  $\sigma$  értékre teljesül, akkor ott  $F(\sigma, \nu(\sigma))$ -nak  $\sigma$  szerinti minden teljes differenciáljának el

kell tűnnie, amiből a következő egyenleteket nyerhetjük:

$$0 = \frac{d}{d\sigma} F(\sigma, \nu(\sigma)) = \frac{d\nu}{d\sigma} \frac{\partial F}{\partial \nu} + \frac{\partial F}{\partial \sigma}; \quad (6.52)$$

$$0 = \frac{d^2 \nu}{d\sigma^2} \frac{\partial F}{\partial \nu} + \left( \frac{d\nu}{d\sigma} \right)^2 \frac{\partial^2 F}{\partial \nu^2} + 2 \frac{d\nu}{d\sigma} \frac{\partial^2 F}{\partial \sigma \partial \nu} + \frac{\partial^2 F}{\partial \sigma^2}; \quad (6.53)$$

$$0 = \frac{d^3 \nu}{d\sigma^3} \frac{\partial F}{\partial \nu} + 3 \frac{d^2 \nu}{d\sigma^2} \frac{d\nu}{d\sigma} \frac{\partial^2 F}{\partial \nu^2} + \left( \frac{d\nu}{d\sigma} \right)^3 \frac{\partial^3 F}{\partial \nu^3} + 3 \frac{d^2 \nu}{d\sigma^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \sigma \partial \nu} + 3 \left( \frac{d\nu}{d\sigma} \right)^2 \frac{\partial^3 F}{\partial \sigma \partial \nu^2} + 3 \frac{d\nu}{d\sigma} \frac{\partial^3 F}{\partial \sigma^2 \partial \nu} + \frac{\partial^3 F}{\partial \sigma^3}, \quad (6.54)$$

és így tovább. A determinisztikus (zajmentes) leképezés periodikus pálya elméletéből meg lehet határozni  $\nu(0)$ -t. Ezek után a  $\sigma \neq 0$  a determinisztikus  $\mathcal{L}|_{\sigma=0}$  Perron-Frobenius operátorhoz adott gyenge perturbációt paraméterez. A fenti formulák lehetővé teszik, hogy  $\mathcal{L}$  sajátértékéhez a perturbatív korrekciókat rekurzívan,  $\sigma^N$ -ben rendről rendre haladva számítsuk ki:

$$\nu(\sigma) = \sum_{N=0}^{\infty} \nu_N \sigma^N, \quad \nu_N = \frac{1}{N!} \left. \frac{d^N}{d\sigma^N} \nu(\sigma) \right|_{\sigma=0}. \quad (6.55)$$

Bevezetve az

$$F_{kl} = \left. \frac{\partial^{k+l}}{\partial \nu^k \partial \sigma^l} F(\sigma, \nu) \right|_{\sigma=0, \nu=\nu(0)} \quad (6.56)$$

jelölést, a (6.52-6.54) egyenletek alapján a  $\nu_m$ -ekre a következő kifejezések adódnak:

$$\nu_1 = -\frac{F_{01}}{F_{10}}; \quad (6.57)$$

$$\nu_2 = -\frac{1}{2 F_{10}} (F_{02} + 2 F_{11} \nu_1 + 2 F_{20} \nu_1^2); \quad (6.58)$$

$$\nu_3 = -\frac{1}{3! F_{10}} (F_{03} + 3 F_{12} \nu_1 + 6 F_{11} \nu_2 + 3 F_{21} \nu_1^2 + 6 F_{20} \nu_1 \nu_2 + F_{30} \nu_1^3),$$

⋮

Az  $F_{lk}$  deriváltakat a spektráldetermináns kummuláns sorfejtéséből lehet megkapni. A  $\sigma$  szerinti sorfejtést is figyelembe véve a kummuláns sorfejtés az

$$F = \det(1 - z\mathcal{L}) = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{N=0}^{\infty} Q_{n,N} z^n \sigma^N \quad (6.59)$$



alakot ölti, és a  $Q_{n,N}$  kummulánsokat a (6.19) egyenlettel analóg rekurziós formulával lehet meghatározni:

$$Q_{n,N} = \frac{1}{n} \left( C_{n,N} - \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{l=0}^N Q_{k,N-l} C_{n-k,l} \right), \quad \text{Tr} \mathcal{L}^n = \sum_N C_{n,N} \sigma^N. \quad (6.60)$$

A kummulánsok és az  $F$  parciális deriváltjai közt az összefüggéseket könnyű kidolgozni, itt bemutatjuk az első néhány deriváltat:

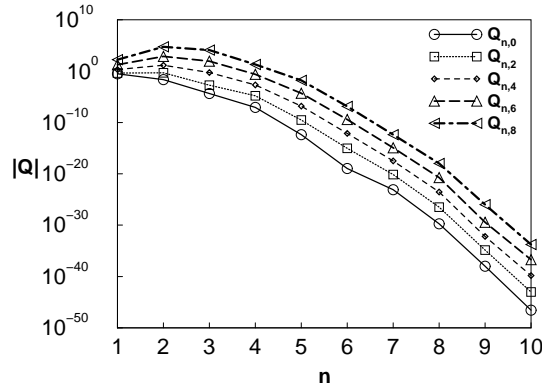
$$\begin{aligned} F_{00} &= 1 - \sum_{m=1}^n Q_{m,0} z_0^m, & F_{10} &= \sum_{m=1}^n m Q_{m,0} z_0^{m-1}, \\ F_{01} &= \sum_{m=1}^n Q_{m,1} z_0^m, & F_{20} &= \frac{1}{2} \sum_{m=2}^n m(m-1) Q_{m,0} z_0^{m-2}, \\ F_{11} &= \sum_{m=1}^n m Q_{m,1} z_0^{m-1}, & F_{02} &= \sum_{m=1}^n Q_{m,2} z_0^m. \end{aligned} \quad (6.61)$$

Ezeket a (6.58) és (6.59) egyenletekbe visszahelyettesítve kapjuk a sajátérték korrekcióit.

### 6.3.3. Numerikus eredmények

A zajos leképezések zaj korrekcióinak kiszámítására a [Cvitanović, Dettmann, Mainieri, Vattay 1998] és a [Cvitanović, Dettmann, Mainieri, Vattay 1999] publikációinkban kidolgoztunk egy a periodikus pályákon alapuló, de szokásos gráf technikát alkalmazó módszert. Ennek segítségével a szökési ráta zaj korrekcióit a  $\sigma^2$  és  $\sigma^4$  rendekben sikerült kiszámítani. Azonban a módszer bonyolultsága a rendek növelésével gyorsan nőtt. Az itt kidolgozott lokális sajátérték módszernél azonban csupán a numerikus módszerek (négyzetes pontosság) limitálták további rendek kiszámítását. A következő részben azt tekintjük át, hogy a (6.20) leképezés esetén hogyan végezhető el az eddig ismertett számítások. Megmutatjuk, hogy ebben az esetben akár a  $\sigma^8$  rendű tagok kiszámítása sem okoz problémát.

Elsőként a determinisztikus rendszer periodikus pályáit határoztuk meg; a pályák szimbolikus dinamikáját felhasználó vissza-iterálós módszerrel. Ennek lényege, hogy egy hiperbolikusan tágító leképezést ellenkező irányban iterálva hiperbolikusan összehúzó leképezést kapunk, és bármilyen kezdeti pontból az iteráció nagyon gyorsan ráhúzódik az adott szimbólum sorozatnak megfelelő periodikus pályára. Rendszerünk teljes bináris szimbolikus dinamikával rendelkezik, ami azt jelenti, hogy az  $n$  elemű 0-ból és 1-esekből álló sorozatok és a rendszer  $n$  hosszúságú periodikus pályái közt kölcsönösen



6.2. ábra: A  $Q_{n,j}$  kummulánsok  $N = 0, 2, 4, 6, 8$  rendű perturbatív korrekciói (melyeket a (6.60) egyenlet definiál) az  $n$  ciklushossz függvényében. Jól látható a szuper-exponenciális konvergencia.

egyértelmű megfeleltetést lehet létrehozni. Ha a pálya egy pontja  $1/2$ -nél kisebb, akkor egy 0 szimbólumot rendelünk hozzá, ha  $1/2$ -nél nagyobb akkor pedig 1-et. A nullában lévő fixpont szimbólum sorozata 00000..., ezt  $\bar{0}$ -val fogjuk jelölni;  $\bar{1}$ -el pedig a másik, egyhez közel eső 11111... szimbólum sorozathoz tartozó fixpontot. A vissza iteráció minden lépésénél a szimbólum sorozat alapján kell eldönteni, hogy a két lehetséges őskép közül melyiket kell választani. Minden primitív pályához kiszámítottuk az  $\mathbf{L}_p$  csonkolt evolúciós mátrixot és  $\mathbf{L}_p^r$  repetícióit  $\sigma$ -ban adott rendig, majd meghatároztuk a (6.48) nyomokat. Az általunk vizsgált leképezésre úgy találtuk, hogy a legtöbb periodikus pályánál a  $16 \times 16$ -os mátrix méretnél az eredmények már dupla pontos számítással is pontosak. Mindazonáltal a rövidebb pályák kevésbé instabilak, így esetükben nagyobb mátrix méreteket kellett használni,  $28 \times 28$  méretűeket a 2-es hosszúságú pályákhoz és  $34 \times 34$  méretűeket a fixpontokhoz. A (6.48) kifejtésben szereplő együtthatók numerikus kiszámítása után a kummulánsok és a perturbatív sajátérték korrekciók meghatározása a (6.60), (6.58) és (6.59) egyenletek segítségével történt. Már az  $n = 2$  maximális pályahosszt figyelembe vevő approximáció is jó közelítést ad (pedig csupán három primitív pályát használ fel), az  $n = 6$  maximális pályahosszt figyelembe vevő közelítés (23 primitív pályával) pedig már eléri a számítógép dupla pontosságát.

A 6.2. ábra a kummulánsok abszolút értékének változását mutatja a figyelembe vett maximális pályahosszal. A 6.1 táblázat a legnagyobb sajátér-

$n$	$\nu_0$	$\nu_2$	$\nu_4$
1	0.308	0.42	2.2
2	0.37140	1.422	32.97
3	0.3711096	1.43555	36.326
4	0.371110995255	1.435811262	36.3583777
5	0.371110995234863	1.43581124819737	36.35837123374
6	0.371110995234863	1.43581124819749	36.358371233836

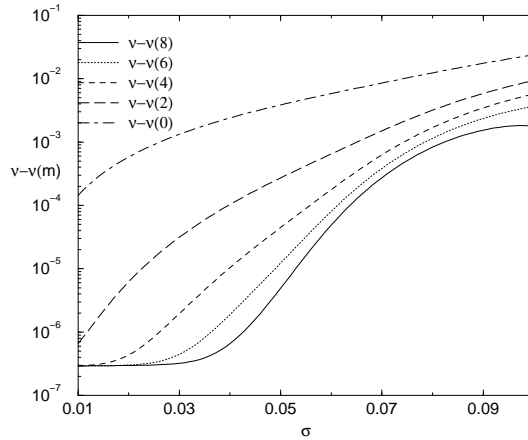
  

$n$	$\nu_6$	$\nu_8$
1	17.4	168.0
2	1573.3	112699.9
3	2072.9	189029.0
4	2076.479	189298.8
5	2076.4770492	189298.12802
6	2076.47704933320	189298.128042526

6.1. táblázat: A  $\nu(\sigma) = \nu_0 + \nu_2\sigma^2 + \nu_4\sigma^4 + \dots + \nu_8\sigma^8$  korrekciók perturbatív együtthatóinak szignifikáns jegyei, a figyelembe vett pályák hosszának függvényében. Minden együttható szuper-exponenciálisan konvergál.

ték perturbatív korrekcióira kapott eredményeket foglalja össze. Mind a kumulánsok, mind a sajátérték korrekciók szuper-exponenciális konvergenciát mutatnak a figyelembe vett maximális pályahossz függvényében. (Szuper-exponenciális alatt olyan függvényeket értünk, melyek logaritmikus skálán ábrázolva gyorsabban csökkennek mint egy lineáris függvény). Determinisztikus esetre már bizonyított a  $\nu_0$  sajátérték szuper-exponenciális konvergenciája [Rugh 1992], azonban a bizonyítás zajos evolúciós operátorok esetére még nincs kiterjesztve. Látható módon a sajátérték korrekciók egy aszimptotikus sorozatot alkotnak. Adott  $\sigma$  érték mellett a sajátértéket megadó sorban a divergens magas rendű  $\nu_m$ -ek miatt a  $\nu_m\sigma^m$  tagok egy bizonyos (a  $\sigma$  értékétől függő)  $m$ -ig csökkennek, majd újra növekedni kezdenek. Ilyen esetekben a legjobb eredményt úgy kaphatjuk, hogy ha megállunk az összegzésben a legkisebb abszolút értékű tagnál.

Többek között azért is esett választásunk a formalizmus tesztelésékor erre az egyszerű rendszerre, mert itt abban a szerencsés helyzetben vagyunk, hogy a szökési rátát (mely az evolúciós operátor legnagyobb sajátértékével azonos) tetszőleges  $\sigma$  zajerősség mellett egyéb numerikus módszerekkel is meglehetősen nagy pontossáig meg lehet határozni. Egyik lehetőség például a magfüggvény diszkretizálása egy térrácson, és a vezető sajátérték numerikus



6.3. ábra: A numerikus diszkretizációból- és a perturbatív sorfejtésből kapott sajátértékek különbségének abszolút értéke  $|\nu(\sigma) - \nu(m, \sigma)|$  a  $\sigma$  függvényében. A  $10^{-7}$ -nél látható platót a numerikus diszkretizáció limitált pontossága okozza.

meghatározása [Cvitanović, Dettmann, Mainieri, Vattay 1998].

A 6.3. ábra a perturbatív eredmények és a numerikus diszkretizáció eredménye közti differencia abszolút értékét mutatja. Látható, hogy a perturbatív közelítés egyre javul, ahogy  $\sigma$ -ban egyre magasabb rendű tagokat veszünk figyelembe.

## 6.4. Az operátor nyomának korrekciói

Láttuk az előző alfejezetben, hogy  $\mathcal{L}^n$  nyomának illetve  $\mathcal{L}$  vezető sajátértékének zajkorrekciói aszimptotikus sort alkotnak. Ezért érdekes lehet számunkra, hogy még messzebb toljuk ki a meghatározható korrekciók rendjét, azért hogy megvizsgáljuk az igazán magas rendű korrekciók viselkedését. Ebben az alfejezetben a legegyszerűbb esetre, az operátor nyomának zajkorrekcióira koncentrálunk. Elsőként bemutatunk egy, a komplex függvénytan reziduum tételén alapuló módszert, melynek segítségével akár  $\sigma^{70}$  rendű korrekciókat is lehet számítani  $\text{Tr}\mathcal{L}$ -hez. Ezek után rátérünk a korrekciók aszimptotikus viselkedésének vizsgálatára, szintén a komplex függvénytanban ismert nyeregpont módszer segítségével.

### 6.4.1. A trace kiszámítása a reziduomtétellel

A (6.26-6.28) egyenletek alapján az evolúciós operátor nyomát az alábbi formában lehet megadni:

$$\mathrm{Tr}\mathcal{L} = \int dx \sum_{N=0}^{\infty} a_{2N} \sigma^{2N} \delta^{(2N)}(x - f(x)). \quad (6.62)$$

A delta-függvényt kifejtve:

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \mathrm{Im} \frac{1}{x - i\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \left( \frac{1}{x - i\epsilon} - \frac{1}{x + i\epsilon} \right), \quad (6.63)$$

és visszahelyettesítve (6.62)-be:

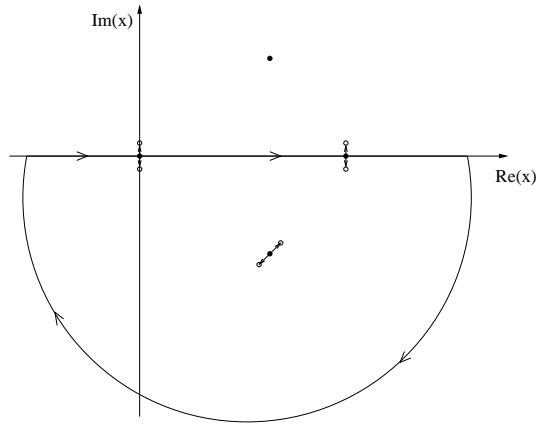
$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\mathcal{L} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(2N)! a_{2N} \sigma^{2N}}{2\pi i} & \left[ \int dx \frac{1}{(x - f(x) - i\epsilon)^{2N+1}} \right. \\ & \left. - \int dx \frac{1}{(x - f(x) + i\epsilon)^{2N+1}} \right]. \end{aligned} \quad (6.64)$$

Az (6.64)-ben szereplő integrál pólusai közel vannak a determinisztikus leképezés fixpontjaihoz. A fixpontokat a következő egyenlettel definiálhatjuk:

$$x^* - f(x^*) = 0. \quad (6.65)$$

A negyedrendű  $f(x)$  leképezésünknek a komplex síkon négy fixpontja van. Kettő közülük a valós tengelyen található, ezek a 6.1 alfejezetben már bemutatott  $\bar{0}$  és  $\bar{1}$  fixpontok. A másik két fixpont pedig egy komplex-konjugált párt alkot. Vizsgáljuk meg közelebbről a (6.64) egyenletben azt az integrált, melynél a nevezőben  $-i\epsilon$  szerepel. Itt az  $x_0$ -nál a pólus a negatív imaginárius félsíkba mozdul el, míg az  $x_1$ -nél levő pólus a pozitív félsíkba húzódik fel. A (6.64) másik integráljánál ellentétes irányban mozdulnak el a pólusok. Ezeket az integrálokat komplex kontúrintegrál módszerrel számítjuk ki. A választott kontúr a 6.4. ábrán látható. A  $-i\epsilon$ -t tartalmazó integrál az  $x = 0$ -nál lévő fixpontból vesz fel járulékot, a másik integrál pedig az  $x_1$ -el jelölt fixpontból. Mindkettőhöz ad járulékot a komplex fixpont is, de ez a két tag kiejti egymást az  $\epsilon \rightarrow 0$  határesetben. Végül az integrálás végeredménye:

$$\mathrm{Tr}\mathcal{L} = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2N)! \sigma^{2N}}{2^N N!} [\mathrm{Res}F_N(x_0) - \mathrm{Res}F_N(x_1)], \quad (6.66)$$



6.4. ábra: A választott kontúr és a pólusok elmozdulása.

ahol

$$F_N(x) = \frac{1}{(x - f(x))^{2n+1}}. \quad (6.67)$$

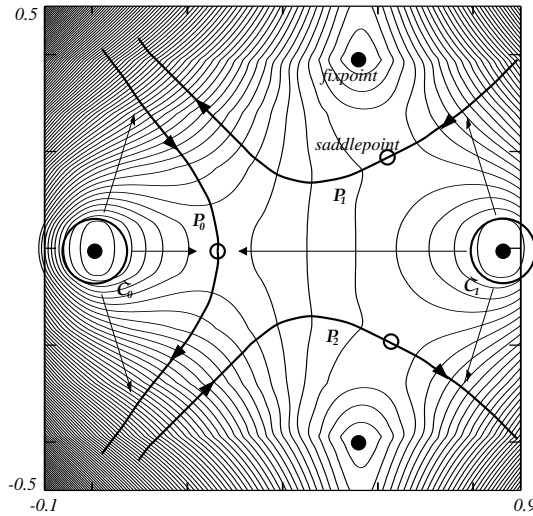
Ezzel a módszerrel további korrekciókat számítottunk ki az operátor nyomához a  $\bar{0}$  és az  $\bar{1}$  szimbólumú pályákra a Mathematica program segítségével,  $\sigma^{70}$  rendig. Ez a módszer igazolta a korábbi eredményeket minden ismert tizedesjegyre. A  $\bar{0}$  pálya minden korrekciója pozitív előjelűnek adódott, míg az  $\bar{1}$  pálya korrekcióinak előjelében oszcilláció mutatkozott. Mind a két sorozat aszimptotikus jellegű volt.

### 6.4.2. Magasabb rendű zajkorrekciók

Ahogy említettük, a reziduum módszerrel  $\sigma^{70}$  rendig sikerült eljutni az evolúciós operátor nyomának meghatározásában, most bemutatjuk miként lehet az ennél még magasabb rendű korrekciókat nagy  $N$  értékekre aszimptotikusan kiszámítani.

Először alakítsuk át a (6.64) integrálokat az alábbiak szerint :

$$I_N = \frac{(2N)!a_{2N}\sigma^{2N}}{2\pi i} \oint dx \frac{1}{(x - f(x) \mp i\epsilon)^{2N+1}} = \frac{(2N)!a_{2N}\sigma^{2N}}{2\pi i} \oint dx e^{-(2N+1) \log(x - f(x) \mp i\epsilon)}. \quad (6.68)$$



6.5. ábra: Az  $|x - f(x)|$  szintvonalai. A sötét körök a fixpontokat jelölik, az üres körök meg a nyeregpontokat. A vastag vonalak a legnagyobb esésű kontúrok mentén húzódnak.

Az  $N$ -et mint nagy paramétert használva, az integrálokat most a nyeregpont módszerrel határozzuk meg. A kezdeti (fixpontokra koncentrált)  $\mathcal{C}_0$  és  $\mathcal{C}_1$  kontúrokat addig deformáljuk, míg elérjük a nyeregpontokon áthaladó legnagyobb esésű kontúrokat, ahogy ezt a 6.5. ábra mutatja.

A legnagyobb esésű kontúrok áthaladnak a nyeregpontokon, melyeket a következő egyenlet definiál:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \log(x_s - f(x_s) \mp i\epsilon) &= \frac{1 - f'(x_s)}{x_s - f(x_s) \mp i\epsilon} = 0, \\ \rightarrow f'(x_s) &= 1. \end{aligned} \quad (6.69)$$

A legfontosabb járulékot a nyeregpontok környezete adja az integrálokhoz, ezeket határozzuk meg most. Az általunk használt leképezésnek három nyeregpontja van, egy valós és egy komplex-konjugált pár. A  $\bar{0}$  pálya esetén az integrálás a  $\mathcal{P}_0$  kontúron megy végig (6.5. ábra), ezért itt csak a valós tengelyen lévő nyeregpont ad járulékot. Vezető rendben az  $I_N^0$ -ra a következőket

kapjuk:

$$I_N^0 = \frac{(2N)! \sigma^{2N}}{2^{N+1} N! \pi} e^{-(2N+1) \log(x_s - f(x_s))} \sqrt{\frac{\pi(x_s - f(x_s))}{(2N+1)f''(x_s)}} = \frac{\sigma^{2N} 2^N \Gamma(N+1/2)}{2\pi(x_s - f(x_s))^{2N} \sqrt{2(N+1/2)(x_s - f(x_s))f''(x_s)}}. \quad (6.70)$$

Az egyszerűbb jelölés kedvéért definiáljuk a következő állandókat:

$$C_0 := \frac{1}{2\pi \sqrt{2(x_s - f(x_s))f''(x_s)}}, \quad (6.71)$$

$$b_0 := \frac{2}{(x_s - f(x_s))^2}, \quad (6.72)$$

melyek segítségével az eredmény az

$$I_N^0 = C_0 \frac{\sigma^{2N} b_0^N \Gamma(N+1/2)}{\sqrt{N+1/2}}. \quad (6.73)$$

alakot ölti.

A 6.6. ábrán az egymást követő  $I_{2N+1}/I_{2N}$  tagok arányát mutatjuk, összevetve az egzakt reziduum számítás és az imént vázolt nyeregpon közelítés eredményét. Az ábra alapján kijelenthetjük, hogy valóban a valós tengelyen lévő nyeregpon járuléka irányítja a viselkedést vezető rendben.

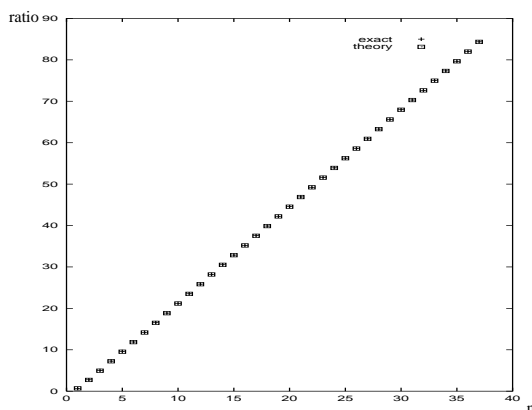
Az  $\bar{I}$  pálya esetén mindhárom nyeregpon releváns, mert az eredeti  $\mathcal{C}_1$  kontúr a  $\mathcal{P}_0, \mathcal{P}_1$  és  $\mathcal{P}_2$  kontúrokba deformálódik át (6.5. ábra). Minthogy egy valós tengelyen értelmezett függvény analitikus folytatásával állunk szemben, a két komplex nyeregpon járuléka egymás komplex konjugáltja. A valós nyeregponnál látottakhoz hasonlóan itt is bevezetünk  $C_1, b_1$  konstansokat, melyek ezúttal komplex számok. Ezek segítségével a komplex nyeregponok járulékát  $I_n^1$ -hez az alábbi formában írhatjuk fel:

$$\frac{\Gamma(N+1/2)}{\sqrt{N+1/2}} [C_1 b_1^N + C_1^+ (b_1^+)^N] = \frac{\Gamma(N+1/2)}{\sqrt{N+1/2}} [r q^N \cos(N\phi - \alpha)]. \quad (6.74)$$

(A  $C_1, b_1$  konstansokból könnyű az  $r, q, \phi$  és  $\alpha$  állandókat kiszámítani.) Az  $\bar{I}$  pályánál a végeredményhez a valós tengelyen lévő nyeregpon járulékát is figyelembe kell venni :

$$I_N^1 = \frac{\Gamma(N+1/2)}{\sqrt{N+1/2}} [C_0 b_0^N + r q^N \cos(N\phi - \alpha)]. \quad (6.75)$$





6.6. ábra: Az  $\frac{I_{2N+2}}{I_{2N}}$  zajkorrekciók az  $N$  függvényében a  $\bar{0}$  pálya esetén.

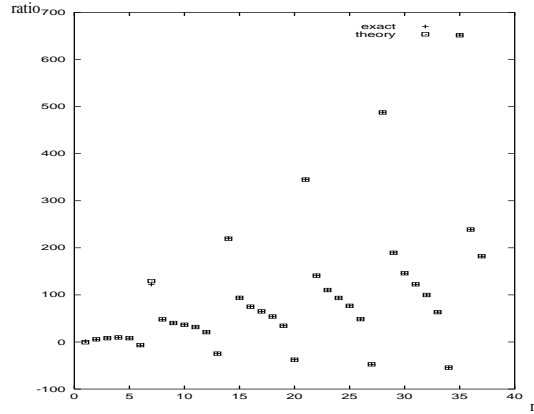
Megjegyezzük, hogy ugyanezek a számítások elvégezhetőek nem Gauss-zaj esetén is. A végeredményben egy szorzófaktor eltérés lenne, mely a kérdéses eloszlás Gauss-eloszlástól eltérő momentumai miatt adódik.

Végül a  $\text{Tr}\mathcal{L}$  korrekcióihoz mind a  $\bar{0}$  mind a  $\bar{1}$  pálya járuléka szükséges, így mindhárom nyeregpontra összegezni kell:

$$\text{Tr}\mathcal{L} = \sum_{N=0}^{\infty} (\text{Tr}\mathcal{L})_N \sigma^{2N}, \quad (6.76)$$

$$(\text{Tr}\mathcal{L})_N = \sum_{s=1}^3 C_s \frac{b_s^N \Gamma(N+1/2)}{\sqrt{N+1/2}} = \frac{1}{2\pi} \sum_{s=1}^3 \frac{\Gamma(N+1/2)}{\sqrt{N+1/2}} \frac{2^N}{\sqrt{2(x_s - f(x_s))f''(x_s)}(x_s - f(x_s))^{2N}}. \quad (6.77)$$

A 6.7. ábrán az egymást követő  $I_{2N+1}/I_{2N}$  tagok arányát mutatjuk az  $\bar{1}$  pályára, mely bonyolultabb viselkedést mutat mint a  $\bar{0}$  pályához tartozó görbe. Ez a domináns komplex nyeregpontoknak köszönhető, melyek egy fázis járulékot is adnak. A 6.8. ábrán az egzakt reziduум módszerhez képest a nyeregpontra eredményeinek relatív hibája van feltüntetve. Látható, hogy az eredmények a magasabb rendek felé egyre javulnak.



6.7. ábra: Az  $\frac{I_{2N+2}}{I_{2N}}$  zajkorrekciók az  $n$  függvényében az  $\bar{I}$  pálya esetén.

## 6.5. Általánosítás tetszőleges rendekre

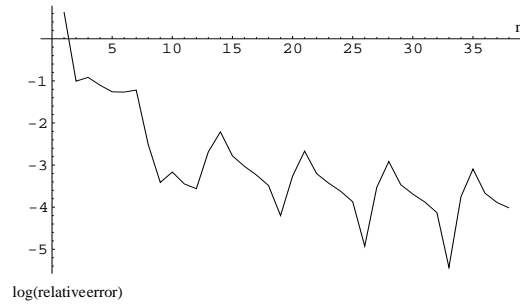
Ebben az alfejezetben kiterjesztjük az előző alfejezetben bemutatott elméletet az operátor  $n$ -ik hatványának zajkorrekcióira. Először definiálunk egy két-dimenziós rendszert, mely magában foglalja az eddig vizsgált egydimenziós rendszert, és definiáljuk ezen rendszer periodikus pályáit, melyeket ezentúl zajos periodikus pályáknak nevezünk. Ezek után az evolúciós operátor egy új, integrál reprezentációjának segítségével megmutatjuk, hogy  $\text{Tr}\mathcal{L}^n$  magas rendű zajkorrekcióit aszimptotikusan egy olyan formulával lehet közelíteni, mely emlékeztet egy trace formulára.

### 6.5.1. Analógia a kvantummechanikával

A soronkövetkező számítások mélyebb megértése céljából ebben az alfejezetben bemutatjuk a kvantummechanika illetve a zajos leképzések közti analógiát.

Felírhatjuk az evolúciós operátor  $n$ -ik hatványának nyomát:

$$\text{Tr}\mathcal{L}^n = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\sigma})^n} \int dx_1 dx_2 \dots dx_n e^{-\frac{S}{\sigma^2}}, \quad (6.78)$$



6.8. ábra: A relatív hiba logaritmus az  $\bar{I}$  pálya esetén.

ahol bevezettük az

$$S = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n (x_{j+1} - f(x_j))^2 \quad (6.79)$$

$$(6.80)$$

jelölést.

A (6.78) kifejezés nagyon hasonló a kvantummechanikában kapott (1.54) Feynman propagátor nyomához. Az (1.55) Feynman-féle pálya menti hatásnak az (6.79) egyenlettel definiált  $S$  feleltethető meg. A különbség abban van, hogy a kvantummechanikai imaginárius  $i/\hbar$  faktornak a zajos esetben a valós  $-\frac{1}{\sigma^2}$  faktor felel meg. Emiatt zajos esetben valós integrálok jelennek meg a kvantummechanikai komplex és oszcilláló integrálok helyett. Bár matematikailag a két probléma teljesen analóg módon kezelhető, a nyeregpont módszer felhasználásával a zajos esetben keletkező  $\sigma^2$  hatványait tartalmazó aszimptotikus sorok összegzése és kezelése sokkal egyszerűbb, mint a formálisan ugyanolyan  $\hbar$  hatványait tartalmazó aszimptotikus soroké. Lényegében könnyebb kezelhetőségük miatt vizsgáljuk a zajos rendszereket és bízunk benne, hogy a vizsgálatuk során nyert módszerek használhatók lesznek a kvantummechanikában is.

A (6.79) egyenlet alapján a legkisebb hatás elve megköveteli, hogy

$$x_j - f(x_{j-1}) - f'(x_j)(x_{j+1} - f(x_j)) = 0. \quad (6.81)$$

Definiálunk egy, a klasszikus impulzusnak megfeleltethető mennyiséget:

$$p_j := x_j - f(x_{j-1}). \quad (6.82)$$

Így a (6.81) egyenlet alapján a következő egyenletrendszerre jutunk:

$$x_{j+1} = f(x_j) + p_{j+1}, \quad (6.83)$$

$$p_{j+1} = \frac{p_j}{f'(x_j)}, \quad (6.84)$$

melyek a klasszikus mozgás Hamilton-egyenleteihez hasonló egyenletek.

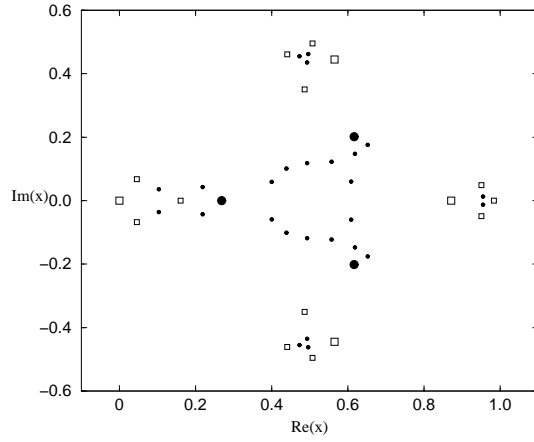
Itt érdemes megjegyezni, hogy a klasszikus mechanikával ilyen módon fennálló kapcsolat kimutatása Graham és Tél [Graham, Tél 1984] nevéhez fűződik, akik a klasszikus hatással analóg (6.80) mennyiséget nem-egyensúlyi potenciálnak nevezték el. A nem-egyensúlyi potenciál és a belőle származtatott (6.83) és (6.84) egyenleteket kiterjedten vizsgálták a nyolcvanas évek végén [Bene, Szépfalusy 1988], és hasznosnak bizonyultak gyenge zajjal perturbált különös attraktorok és repellorok tulajdonságainak feltárásában is [Graham, Hamm, Tél 1991], melynek jó összefoglalása található [Graham, Hamm 1992]-ben.

A rendszerünk zajos periodikus pályái azon pályák, melyek kielégítik ezeket az egyenleteket, továbbá  $x_{n+1} = x_1$ ,  $p_{n+1} = p_1$ . Később látni fogjuk, hogy a  $\text{Tr}\mathcal{L}^n$  magas rendű zajkorrekcióinak aszimptotikus viselkedését azon zajos periodikus pályák fogják kontrolálni, melyeknek nem zérus az impulzusuk. Ha  $p_j = 0$ , akkor (6.83) átmegy az (6.1) egyenletbe, és  $p_{j+1}$  is nulla lesz. Ekkor visszakapjuk az eredetileg definiált egydimenziós leképezést. A nulla impulzusú zajos periodikus pályák ezért a (6.10) és (6.11) egyenletekkel definiált hagyományos periodikus pályáknak felelnek meg. Mind a nem nulla impulzusú zajos periodikus pályák, mind a hagyományos módon definiált periodikus pályák a komplex síkon a növekvő pályahosszal egy-egy burjánzó, fraktálszerű képződményt hoznak létre, amint az a 6.9. ábrán látható.

### 6.5.2. Az evolúciós operátor Fourier reprezentációja

A zajos evolúciós operátornak felírható egy olyan integrál (Fourier) reprezentációja is, ami a későbbi számításainkhoz elengedhetetlen:

$$\mathcal{L}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(y-f(x))^2}{2\sigma^2}} = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{-\frac{\sigma^2 k^2}{2} + ik(y-f(x))}. \quad (6.85)$$



6.9. ábra: Az eredeti és a zajos periodikus pályák,  $n = 1, 2$  pályahosszra. A négyzetek az eredeti periodikus pályákat jelölik, a pöttyök az zajos pályákat; a nagy szimbólumok az egy hosszúságú pályákat jelölik, kis szimbólumok a kettő hosszúságúakat.

Ennek segítségével az  $n$ -ik hatvány nyoma:

$$\text{Tr} \mathcal{L}^n = \frac{1}{(2\pi)^n} \int dk^n dx^n e^{-\frac{\sigma^2}{2} \sum_{j=1}^n k_j^2 + i \sum_{j=1}^n k_j (x_{j+1} - f(x_j))}, \quad (6.86)$$

melyet átírva:

$$\text{Tr} \mathcal{L}^n = \frac{1}{(2\pi)^n} \int dk^n \int dp^n J(p) e^{-\frac{\sigma^2}{2} \sum_{j=1}^n k_j^2 + i \sum_{j=1}^n k_j p_j}, \quad (6.87)$$

ahol  $J(p) = D(x)/D(p)$  a Jacobi-mátrixot jelöli. Felhasználva, hogy

$$\frac{1}{(2\pi)^n} \int dk^n e^{i \sum_{j=1}^n k_j p_j} = \prod_{j=1}^n \delta(p_j), \quad (6.88)$$

a (6.87) kifejezést az alábbi elegáns formába írhatjuk:

$$\text{Tr} \mathcal{L}^n = \int dp^n J(p) e^{\frac{\sigma^2}{2} \Delta} \prod_{j=1}^n \delta(p_j) = e^{\frac{\sigma^2}{2} \Delta} J(p) \Big|_{p_j=0}, \quad (6.89)$$

ahol  $\Delta$  a Laplace-operátor:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial p_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial p_2^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial p_n^2}. \quad (6.90)$$

### 6.5.3. A trace formula korrekcióinak trace formulája

A (6.89) zajszélesség paraméter szerinti Taylor-kifejtését vizsgáljuk:

$$\mathrm{Tr}\mathcal{L}^n = \sum_{N=0}^{\infty} (\mathrm{Tr}\mathcal{L}^n)_N \sigma^{2N}, \quad (6.91)$$

$$(\mathrm{Tr}\mathcal{L}^n)_N = \frac{1}{2^N} \frac{\Delta^N}{N!} J(p) \Big|_{p_j=0}. \quad (6.92)$$

Ha részletesen kiírjuk a fenti egyenletben szereplő Laplace-operátor  $N$ -ik hatványát:

$$\Delta^N = \sum_{j_1, \dots, j_n=0}^{\infty} \frac{N!}{j_1! \dots j_n!} \frac{\partial^{2j_1}}{\partial p_1^{2j_1}} \dots \frac{\partial^{2j_n}}{\partial p_n^{2j_n}} \delta_{N, \sum_{k=1}^n j_k}, \quad (6.93)$$

ahol  $\delta_{jl}$  a Kronecker-deltát jelöli. Az alábbi multidimenziós reziduum formula, melyet [Bochner, Martin 1948]-ból vettünk, nagy hasznunkra lesz (6.93) átalakításánál:

$$\frac{\partial^{n_1+\dots+n_k} f(z)}{\partial z_1^{n_1} \dots \partial z_k^{n_k}} = \frac{n_1! \dots n_k!}{(2\pi i)^k} \oint_{c_1} \dots \oint_{c_k} \frac{f(\xi) d\xi_1 \dots d\xi_k}{(\xi_1 - z_1)^{n_1+1} \dots (\xi_k - z_k)^{n_k+1}}. \quad (6.94)$$

Ezt beírva (6.93)-ba és (6.92)-be az alábbi kifejezést kapjuk:

$$\begin{aligned} (\mathrm{Tr}\mathcal{L}^n)_N &= \frac{1}{(2\pi i)^n 2^N} \sum_{j_1, \dots, j_n=0}^{\infty} \frac{(2j_1)!}{j_1!} \dots \frac{(2j_n)!}{j_n!} \\ &\quad \times \delta_{N, \sum_{k=1}^n j_k} \oint_{c_1} \dots \oint_{c_n} \frac{J(p) dp_1 \dots dp_n}{p_1^{2j_1+1} \dots p_n^{2j_n+1}}. \end{aligned} \quad (6.95)$$

A kontúrok a  $p_j = 0$  pontok körül futnak. Ha visszatranszformáljuk az integrálokat az eredeti  $x_j$  változók szerinti integrálokká, akkor a kontúrok így az eredeti (a (6.10) és (6.11) egyenletek által definiált) periodikus pályák körül fognak futni, hiszen ezek a pályák teljesítik a  $p_j = 0$  feltételeket. Levezetésünkben a továbbiakban az aszimptotikus (nagy  $N$ ) határesetet vizsgáljuk. A (6.95)-ben szereplő összegzéseket integrálokkal fogjuk helyettesíteni, majd az integrálásokat a nyeregpontról módszerrel fogjuk elvégezni. Első lépésként a faktoriálisokat a Stirling-formulával [Abramowitz, Stegun 1972] közelítjük:

$$\frac{(2j_k)!}{j_k!} \simeq \frac{\left(\frac{2j_k}{e}\right)^{2j_k} \sqrt{4\pi j_k}}{\left(\frac{j_k}{e}\right)^{j_k} \sqrt{2\pi j_k}} = 2^{2j_k+1/2} j_k^{j_k} e^{-j_k} = 2^{1/2} e^{2(\ln 2)j_k + j_k \ln j_k - j_k}. \quad (6.96)$$

Felhasználva még a delta-függvény egy integrál reprezentációját, a (6.95) egyenlet a következő formát ölti:

$$\begin{aligned}
(\text{Tr}\mathcal{L}^n)_N &\simeq \frac{2^{\frac{n}{2}-N}}{(2\pi i)^n 2\pi} \sum_{j_1, \dots, j_n=0}^{\infty} \int dt \oint_{c_1} \dots \oint_{c_n} dx_1 \dots dx_n \\
&\times \exp \left[ it \left( N - \sum_{k=1}^n j_k \right) + (2 \ln 2 - 1) \sum_{k=1}^n j_k + \sum_{k=1}^n j_k \ln j_k \right. \\
&\left. + \sum_{k=1}^n \ln(x_k - f(x_{k-1}))(2j_k + 1) \right]. \tag{6.97}
\end{aligned}$$

Az  $y_k = \frac{j_k}{N}$  új változókkal az aszimptotikus (nagy  $N$ ) határesetben az  $y_k$ -k szerinti összegzéseket  $y_k$ -szerinti integrálokkal közelítve:

$$\begin{aligned}
(\text{Tr}\mathcal{L}^n)_N &\simeq \frac{2^{\frac{n}{2}-N} N^n}{(2\pi i)^n 2\pi} \int_0^\infty dy_1 \dots \int_0^\infty dy_n \int dt \oint_{c_1} \dots \oint_{c_n} dx_1 \dots dx_n \\
&\times \exp \left[ it \left( N - N \sum_{k=1}^n y_k \right) + N(2 \ln 2 - 1) \sum_{k=1}^n y_k \right. \\
&\left. + N \sum_{k=1}^n y_k \ln(Ny_k) + \sum_{k=1}^n \ln(x_k - f(x_{k-1}))(2Ny_k + 1) \right]. \tag{6.98}
\end{aligned}$$

Az  $y_k$ -k szerinti integrálokat a nyeregpont módszerrel végezzük el, melynek eredménye:

$$(\text{Tr}\mathcal{L}^n)_N \simeq \frac{2^{-N+\frac{n}{2}}}{(2\pi)^{\frac{n}{2}} i^n 2\pi} \int dt \oint_{c_1} \dots \oint_{c_n} dx_1 \dots dx_n e^{it(N+\frac{n}{2})-e^{it}\frac{S}{2}}. \tag{6.99}$$

Következő lépésként a  $t$  változó szerinti integrálnál is alkalmazzuk a nyeregpont közelítést, mely a

$$(\text{Tr}\mathcal{L}^n)_N \simeq \frac{N^{\frac{n-1}{2}}}{2^{2N+\frac{1}{2}} (2\pi)^{\frac{n+1}{2}} i^{n+1}} \frac{(2N)!}{N!} \int dx^n e^{-(N+\frac{n}{2}) \log(S)} \tag{6.100}$$

formulát eredményezi. Az utolsó lépés, ami még hátra van, az  $x_k$ -k szerinti kontúrintegrálok elvégzése. A szokott módon deformáljuk a kontúrokat, míg

az integrálási útvonalak át nem haladnak a nyeregpontokon a legnagyobb esésű kontúrok mentén. A nyeregpontokat a következő egyenlet definiálja:

$$\frac{1}{S} [x_j^* - f(x_{j-1}^*) - (x_{j+1}^* - f(x_j^*))f'(x_j^*)] = 0. \quad (6.101)$$

Ha összehasonlítjuk az (6.101) és a (6.81) egyenleteket, világossá válik, hogy minden nyeregpont egyben a rendszerünk egy zajos periodikus pályája is. Az integrálási kontúrok eredetileg a nulla impulzusú pályák körül futottak, ezért ezeket a pályákat nem kell most mint nyeregpontokat figyelembe venni. A nyeregpont közelítésnél felbukkanó második derivált mátrix:

$$- \left(N + \frac{n}{2}\right) \frac{1}{S} D^2 S, \quad (6.102)$$

ahol  $D^2 S$  az  $S$  második deriváltját jelöli:

$$(D^2 S)_{ij} = \frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x_j}. \quad (6.103)$$

Ezzel a második derivált mátrixszal lett volna dolgunk, ha rögtön a (6.78) kifejezést próbáltuk volna nyeregpont módszerrel átalakítani. A (6.100) egyenletben most átalakítjuk a prefaktort a Stirling-formula segítségével, és így a nyeregpont integrálás végeredményére a

$$(\text{Tr} \mathcal{L}^n)_N \simeq \sum_{s.p.} \frac{N^{\frac{n-1}{2}} \Gamma(N + \frac{1}{2})}{2\pi i (N + \frac{n}{2})^{\frac{n}{2}}} \frac{S_p^{-N}}{\sqrt{\det D^2 S_p}} \quad (6.104)$$

kifejezést nyerjük. Az  $n = 1$  esetben ez visszaadja az 6.4.2 alfejezetben levezetett (6.77) képletünket.

Az imént megismert  $D^2 S$  mátrix és a zajos periodikus pályák stabilitási mátrixa között szoros összefüggés van. Ez utóbbi a következő formában adható meg:

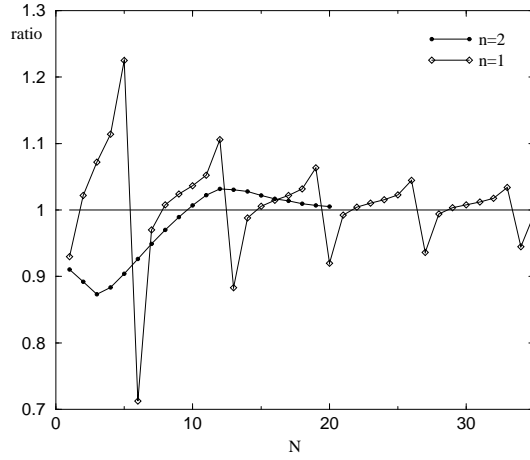
$$J = J_1 \cdot J_2 \cdot J_3 \dots \cdot J_n, \quad (6.105)$$

$$J_k = \begin{pmatrix} f'(x_k) - \frac{p_k}{(f'(x_k))^2} f''(x_k) & \frac{1}{f'(x_k)} \\ -\frac{p_k}{(f'(x_k))^2} f''(x_k) & \frac{1}{f'(x_k)} \end{pmatrix}. \quad (6.106)$$

Amint az direkt számítással belátható,  $D^2 S$  a stabilitási mátrixszal az alábbi módon fejezhető ki :

$$\det D^2 S_p = \det(J_p - 1). \quad (6.107)$$





6.10. ábra: A  $(\text{Tr}\mathcal{L}^2)_N$ -re a (6.104)-ből kapott eredmény és a numerikus integrálásból kapott eredmény aránya.

Ezt a (6.104)-be helyettesítve a

$$(\text{Tr}\mathcal{L}^n)_N \simeq \frac{N^{\frac{n-1}{2}} \Gamma(N + \frac{1}{2})}{2\pi (N + \frac{n}{2})^{\frac{n}{2}}} \sum_{p.o.} \frac{e^{-N \log S_p}}{\sqrt{\det(1 - J_p)}} \quad (6.108)$$

kifejezést kapjuk, ahol az összegzés azokon a zajos periodikus pályákon fut végig, melyeknek nem nulla az impulzusa. Ez a kifejezés teljesen analóg egy trace formulával.

Végezetül rátérünk eredményeink numerikus ellenőrzésére. A 6.4.1 alfejezetben kifejlesztettünk egy kontúrintegrál módszert az operátor nyomának kiszámítására, és megmutattuk, hogy azzal jól egyezik formulánk  $n = 1$ -re. Most továbblépve, numerikusan fogjuk meghatározni az  $\mathcal{L}^2$  nyomának magas rendű korrekcióit. A (6.95) egyenletből indulunk ki oly módon, hogy a  $p$  szerinti integrálokat visszatranszformáljuk  $x$  szerinti integrálokká:

$$\begin{aligned} (\text{Tr}\mathcal{L}^n)_N &= \frac{1}{(2\pi i)^n 2^N} \sum_{j_1, \dots, j_n=0}^{\infty} \frac{(2j_1)!}{j_1!} \dots \frac{(2j_n)!}{j_n!} \\ &\times \delta_{N, \sum_{k=1}^n j_k} \oint_{c_1} \dots \oint_{c_n} \frac{dx_1 \dots dx_n}{(x_1 - f(x_n))^{2j_1+1} \dots (x_n - f(x_{n-1}))^{2j_n+1}}. \end{aligned} \quad (6.109)$$

A (6.95) egyenletnél a kontúrok a  $p_j = 0$  pontok körül futottak, ezért a fenti kifejezésben a kontúrok a rendszer eredeti, a (6.10) és (6.11) által definiált, periodikus pályái körül futnak. Ezeket a kontúrintegrálokat végeztük el numerikusan. A 6.10. ábra a  $(\text{Tr}\mathcal{L}^2)_N$ -re a (6.104) illetve az imént vázolt eljárás alapján kapott eredmények arányát mutatja, az  $N$  függvényében.

## Összefoglalás

Ebben a fejezetben egydimenziós zajos leképezések  $\mathcal{L}$  evolúciós operátorának zajkorrekcióit vizsgáltuk. Az operátor mátrix reprezentációjának segítségével nyolcadrendű perturbatív korrekciókat számítottunk ki mind a szökési rátához, mind  $\text{Tr}\mathcal{L}^n$ -hez. Kifejlesztettünk egy reziduum számításon alapuló módszert, melynek segítségével akár a hetvened rendű korrekciókat is meg lehet határozni  $\text{Tr}\mathcal{L}$ -hez. Megadtunk egy közelítő formulát is  $\text{Tr}\mathcal{L}$  magas rendű korrekcióinak aszimptotikus viselkedésére, mely jól egyezik az egzakt eredményekkel. Ezt a formulát azután általánosítottuk  $\text{Tr}\mathcal{L}^n$  esetére is, és megmutattuk, hogy az aszimptotikus tartományban a zajkorrekciókat egy olyan kifejezéssel lehet közelíteni, mely analóg egy trace formulával.

## 7. Fejezet

# A kváziklasszikus operátor

A klasszikus mechanikában bevezetett (1.44) spektráldetermináns egzakt, míg a szemiklasszikus (1.75) spektráldeterminánst a nyeregpont közelítéssel vezettük le a kvantummechanikából, és ennek megfelelően az nem egzakt. Ezért azt várjuk, hogy a belőle származtatott energiaszintek vagy rezonanciák eltérnek a pontos kvantummechanikai megfelelőiktől. Azt gondolhatnánk, hogy ez pusztán abból ered, hogy a  $\hbar$  vezető rendjében érvényes formula nem tudja reprodukálni azokat a kvantum jelenségeket – mint például a diffrakciót – amelyek  $\hbar$  magasabb rendjeihez kapcsolódnak. Azonban a helyzet nem ilyen egyszerű. A szemiklasszikus determináns gyakorlati felhasználásakor ugyanis általában csak véges számú periodikus pályát használhatunk fel, fontos hogy a (1.75) kiszámítására a pályák hosszával kellő gyorsasággal konvergáló módszer álljon rendelkezésre. Konkrétan, az (1.79) kummuláns sorfejtés tagjainak kell gyorsan konvergálniuk. Mint a bevezetőben már utaltunk rá, míg az (1.44) klasszikus spektráldetermináns (1.46) kummuláns kifejtésének együtthatói szuper-exponenciális ( $|Q_k| \sim e^{-ck^\alpha}$ ,  $\alpha > 1$ ) módon konvergálnak, addig az (1.79) szemiklasszikus kummulánsok konvergenciáját csak exponenciálisan gyorsnak ( $|Q_k| \sim e^{-ck}$ ) találták [Eckhardt, Russberg 1992], [Cvitanović, Rosenqvist 1992] a három diszk rendszer esetén. Az exponenciálisan és a szuper-exponenciálisan konvergáló kummulánsok közti különbség az, hogy míg a szuper-exponenciális esetben az  $f(z) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} Q_k(E)z^k$  összeggel definiált függvény minden véges  $z$  érték esetén abszolút konvergens és holomorf, addig az exponenciálisan konvergens esetben az abszolút konvergencia csak egy véges ( $|z| < e^c$ ) konvergencia sugáron belül áll fenn, és  $f(z)$  meromorf.

A  $z = 1$  értéknek, ahol a számításokat végezzük, bele kell esnie az ab-

szolút konvergencia tartományába, máskülönben nagy nehézségekkel nézünk szembe. Az abszolút konvergencia hiányának gyakorlati következményét egy példán szemléltethetjük. Elegendően nagy ( $k > k^*$ ) index esetén helyettesítjük az exponenciálisan konvergáló kummulánsokat aszimptotikus  $Q_k(E) \approx C_0 q^k(E)$  alakjukkal. Ekkor a kummulánsok összege a konvergencia tartományon belül

$$f(z) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} Q_k(E) z^k \approx 1 + \sum_{k=1}^{k^*} Q_k(E) z^k + C_0 \frac{(zq(E))^{k^*}}{1 - zq(E)}, \quad (7.1)$$

azaz a függvénynek pólusa lesz a konvergencia határ közelében. A gyakorlati számítások során mindig a  $z = 1$  helyettesítést kell elvégezni. A pólus helye ilyenkor nem a  $z$  síkon, hanem a komplex energia sík,  $q(E) = 1/z = 1$  egyenlettel meghatározott helyein lép fel. A gyakorlatban a végtelen szummázás helyett (7.1)-et csak egy adott  $k_{max}$ -ig végezzük. Ilyenkor a pólus helyett egy olyan geometriai sor összeget kapunk:

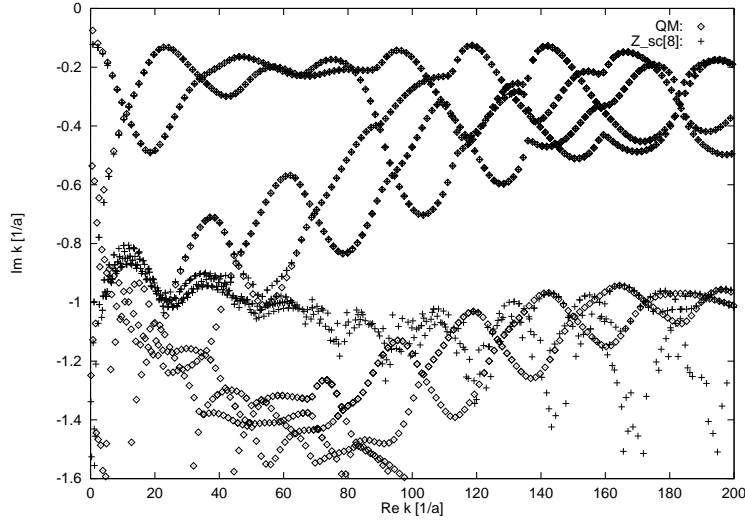
$$1 + \sum_{k=1}^{k_{max}} Q_k(E) z^k \approx 1 + \sum_{k=1}^{k^*} Q_k(E) z^k + C_0 \frac{(zq(E))^{k^*} (1 - (zq(E))^{k_{max}-k^*+1})}{1 - zq(E)}, \quad (7.2)$$

melynek nincs pólusa a  $q(E) = 1/z$  helyen, azonban a pólus helyett nagy  $k_{max}$  esetén rendkívül sok "látszólagos" (hamis) zéróhely jelentkezik az

$$1 - (zq(E))^{k_{max}-k^*+1} \approx 0$$

megoldásainál a  $q_i(E) = e^{i2\pi i/(k_{max}-k^*+1)}/z$ ,  $i = 1, 2, \dots, k_{max}-k^*+1$  helyeken. A komplex energia síkon  $k_{max}$  növelésével a hamis zérók akkumulálódnak a  $|q(E)| = 1$ -gyel meghatározott görbék mentén.

A három diszk esetén meg is lehet figyelni ezeket a hamis zérókat [Eckhardt, Russberg 1992], [Cvitanović, Rosenqvist 1992], [Cvitanović, Rosenqvist, Vattay, Rugh 1993], melyek a komplex síkon az  $\text{Im} k \approx -1$  vonal alatt akkumulálódnak. A hamis zérók megtalálása után intenzív elméleti munka kezdődött annak érdekében, hogy feltárják mi is a pontos oka ennek a jelenségnek, hogyan lehet ezt a problémát matematikailag kezelni, és hogy van-e valami elvi fizikai oka a pólusoknak. A megoldás felé vezető fontos lépés volt, hogy Rugh [Rugh 1992] bebizonyította, hogy megfelelően erős kaoticitást mutató ún. Axiom-A [Smale 1965, Bowen 1975] rendszerek (melyek közé a klasszikus három diszk rendszer is tartozik a standard  $R : a = 6 : 1$



7.1. ábra: A három diszk rendszer ( $R : a = 6 : 1$ ) spektráldeterminánsának zérus helyei a komplex hullámszám síkon, az első nyolc kummuláns felhasználásával ( $0 = 1 + \sum_{k=1}^8 Q_k(E)$ ). Jól látható, hogy az  $\text{Im}k \approx -1$  vonal környékén sok látszólagos zérushely lép fel, melyekhez nem tartozik igazi rezonancia. További kummulánsok figyelembe vétele esetén még több hamis zéró halmozódik fel ezen a környéken [Cvitanović, Vattay, Wirzba 1997].

paraméterek mellett) esetén az

$$\mathcal{L}^t(x', x) = e^{W(x,t)} \delta(x' - f^t(x)) \quad (7.3)$$

típusú klasszikus evolúciós operátorokhoz tartozó spektráldetermináns holomorf, abban az esetben, ha a  $e^{W(x,t)}$  súly *multiplikatív* a pálya mentén:

$$e^{W(x,t)} = e^{W(f^{t_1}(x), t-t_1)} e^{W(x, t_1)}.$$

(Ez azt is jelenti, hogy  $W$  kielégíti a  $W(x, t) = W(f^{t_1}(x), t - t_1) + W(x, t_1)$  *additivitási* feltételt tetszőleges  $t_1$  és  $x$  mellett.) A multiplicitási feltétel biztosítja azt, hogy a (7.3) operátorok félcsoportot alkossanak, és kielégítsék a szokásos kompozíciós szabályt:

$$\mathcal{L}^t(x', x) = \int dy \mathcal{L}^{t-t_1}(x', y) \mathcal{L}^{t_1}(y, x). \quad (7.4)$$

Könnyen belátható, hogy az (1.24)-ben bevezetett (7.3) típusú operátorban fellépő  $e^{\beta \int_0^t d\tau A(f^\tau(x))}$  súly teljesíti a multiplicitási feltételt. A fizikus számára a Rugh által bizonyított tétel a gyakorlatban azt jelenti, hogy amennyiben találunk egy olyan (7.3) típusú klasszikus operátort, ami kielégíti a szokásos operátor kompozíciós szabályt, azaz tényleg a fizikában megszokott értelemben időfejlesztő operátornak nevezhetjük, akkor Axiom-A rendszerek esetén a spektráldetermináns holomorf lesz, és kiszámításakor nem lépnek fel hamis zérók.

A (7.3) operátorhoz tartozó (1.45)-el analóg spektráldetermináns a következő alakú:

$$Z_W(s, z) = \exp \left( - \sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{z^{rn_p}}{r} \frac{e^{rW_p - srT_p}}{|\det(\mathbf{1} - \mathbf{J}_p)|} \right), \quad (7.5)$$

ahol  $W_p = W(x_p, T_p)$  a periodikus pályára kiszámított súly értéke. A szemiklasszikus számítások esetén fellépő hamis zérók kivédésére elegendő volna, ha az (1.77) szemiklasszikus spektráldetermináns kiszámítása visszavezethető volna klasszikus operátorok spektráldeterminánsának kiszámítására. Az (1.77) és konkrétan a három diszk probléma esetén releváns kétdimenziós esetben érvényes (1.80) spektáldetermináns alakjának részletes vizsgálata [Cvitanović, Rosenqvist, Vattay, Rugh 1993] arra vezet, hogy olyan súlyt kell találnunk, amely a periodikus pályán kiszámítva visszaadja a szemiklasszikus spektráldeterminánsokban fellépő  $|\Lambda_p|^{1/2}$  faktort, ahol  $\Lambda_p$  a  $J_p$  Jacobi mátrix sajátértéke. Azonban ennek a feltételnek a teljesítése nem könnyű. Ugyanis, míg egy klasszikus pálya szakaszaihoz tartozó Jacobi stabilitási mátrixok multiplikatívak, azaz  $J_{ab} = J_a J_b$  egy pálya egymást követő  $a$  és  $b$  szegmenseire, addig a Jacobi mátrix sajátértékei nem multiplikatívak  $\Lambda_{ab} \neq \Lambda_a \Lambda_b$ . Így például, ha egy

$$\mathcal{L}^t(x', x) = |\Lambda^t(x)|^{1/2} \delta(x' - f^t(x)) \quad (7.6)$$

alakú operátort próbálunk definiálni, ahol  $\Lambda^t(x)$  a stabilitási mátrix valamelyik sajátértéke, akkor az így definiált operátor nem elégíti ki a (7.4) szabályt.

Itt érdemes megjegyezni, hogy a Jacobi mátrix sajátértékeinek hatványaival arányos operátorok fontos szerepet játszanak a kaotikus rendszerek termodinamikai formalizmusában is. A termodinamikai formalizmus esetén azonban általában csak az operátor legnagyobb sajátértékének a meghatározása [Szépfalussy, Tél, Csordás, Kovács 1987] a cél. Ilyenkor a spektráldeter-

termináns holomorf viselkedését nem kell megkövetelni. Többdimenziós esetben ilyen operátor definiálható a stabil és instabil sokaságok felhasználásával, melynek szép példáját láthatjuk [Bene 1989]-ben.

A következő részben [Vattay 1994(2)], [Cvitanović, Vattay 1993], [Cvitanović, Rosenqvist, Vattay, Rugh 1993], [Pollner, Vattay 1996] és [Cvitanović, Vattay, Wirzba 1997] alapján megmutatjuk, hogy hogyan található olyan multiplikatív klasszikus evolúciós operátor, amely lehetővé teszi a szemiklasszikus számításokat olyan tartományokon is, ahol az (1.79) Gutzwiller-Voros spektráldetermináns már nem abszolút konvergens.

## 7.1. Időfejlődés az érintőterben

Belátható, hogy kizárólag a fázistér változóinak használatával nem definiálható olyan súlyfüggvény, amely a periodikus pályákhoz a Jacobi mátrix valamelyik sajátértékét rendeli. A megoldást az jelenti, ha dinamikai rendszer időfejlődését kiegészítjük a dinamikai rendszer érintőterében folyó dinamikával, és a kettőt egy kiterjesztett rendszerként kezeljük, amihez az ötletet a Ljapunov exponens számításának egyik bevett módszere [Bennettin, Galgani, Strelcyn 1980] szolgáltatja.

Vegyünk a dinamikai rendszer  $\mathcal{M}$  fázissterében egy  $x_0$  kezdőpontot, és egy a fázistér  $\mathcal{T}\mathcal{M}_{x_0}$  érintőterébe tartozó  $\xi(0)$  vektort és tekintsük ezek időfejlődését. Az  $(x, \xi)$  pár időfejlődését az ismert ún. variációs egyenletek [Arnold 1978]:

$$\dot{x} = F(x), \quad \dot{\xi} = \mathbf{DF}(x)\xi$$

adják meg, ahol  $\mathbf{DF}(x)$  a differenciálegyenlet jobb oldalának derivált mátrixa. Az egyenletek megoldása:

$$x(t) = f^t(x_0), \quad \xi(t) = \mathbf{J}^t(x_0) \cdot \xi_0, \quad (7.7)$$

ahol a  $\xi$  érintőtérbeli vektort a  $\mathbf{J}^t(x_0) = \partial x(t)/\partial x_0$  Jacobi mátrix fejleszti időben.

Mint említettük, a Jacobi mátrix sajátértékei nem multiplikatívak, azonban az érintőtérbeli vektor növekedési rátája már az:

$$\frac{|\xi(t+t')|}{|\xi(0)|} = \frac{|\xi(t+t')|}{|\xi(t)|} \times \frac{|\xi(t)|}{|\xi(0)|}. \quad (7.8)$$

Hosszú idő után az érintővektor  $|\xi(t)|/|\xi(0)|$  növekedési rátája a Jacobi mátrix legnagyobb sajátértékével arányosan növekszik.

Az érintővektort célszerű minden időpontban felbontani egy egységvektor és a vektor hosszának szorzatára. Ezt úgy tesszük meg, hogy először bevezetünk egy  $g$  vektor-skalár függvényt, amely minden pozitív és negatív valós  $c$  szám esetén kielégíti a  $g(c\xi) = cg(\xi)$  egyenletet, és a továbbiakban előjeles normafüggvénynek nevezzük. Az előjeles normafüggvényre egy példa az a függvény, amely minden vektorhoz annak  $d$ -edik komponensét rendeli:

$$g \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \dots \\ \xi_d \end{pmatrix} = \xi_d. \quad (7.9)$$

Ennek segítségével a vektort minden pillanatban egy előjeles norma és egy egységvektor szorzataként írjuk:

$$\xi(t) = \Lambda^t \mathbf{u}(t),$$

ahol  $\mathbf{u}(t) = \xi(t)/g(\xi(t))$ , és  $\Lambda^t = g(\xi(t))$ . Ezután bevezetjük a következő definícióval a nyújtási faktort:

$$\Lambda^t(x_0, \mathbf{u}_0) = g(\xi(t)) = g(\mathbf{J}^t(x_0) \cdot \mathbf{u}_0), \quad (7.10)$$

ami arányos a (7.8)-ban bevezetett növekedési rátával. A nyújtási faktor multiplikatív a pálya mentén:

$$\Lambda^{t'+t}(x_0, \mathbf{u}_0) = \Lambda^{t'}(x(t), \mathbf{u}(t)) \Lambda^t(x_0, \mathbf{u}_0).$$

Az egységvektorok időbeli fejlődését megadó  $\mathbf{u}(t) = R^t(x_0, \mathbf{u}_0)$  leképezést a (7.7) és (7.10) hányadosából számíthatjuk ki:

$$\mathbf{u}' = R^t(x, \mathbf{u}) = \frac{1}{\Lambda^t(x, \mathbf{u})} \mathbf{J}^t(x) \cdot \mathbf{u}. \quad (7.11)$$

Az érintőtérbeli egységvektorok között van egy speciális, ami egy adott  $x$  pontban a differenciálegyenlet vektorterének irányába mutat, és  $\mathbf{u} = \frac{F(x)}{g(F(x))}$  alakban írható. Ezek a vektorok időfejlődésük során mindig párhuzamosak maradnak a differenciálegyenlet jobboldalának vektorterével. A hozzájuk tartozó nyújtási faktorok pedig a  $t \rightarrow \infty$  határértékben a  $\Lambda^t(x, \mathbf{u}) \rightarrow 1$  értékhez tartanak. Az érintőteret minden pontban felbonthatjuk a differenciálegyenlet vektorterével párhuzamos vektorra, és az arra merőleges többi vektor által kifeszített vektortérre. A (7.11) leképezés ez utóbbi teret önmagára képzi le, mivel a differenciálegyenlet vektorterére merőleges egységvektorok minden további időpillanatban merőlegesek maradnak. Jelöljük  $ETM$ -el a merőleges érintővektorok terét, és szűkítsük le a (7.11) dinamikát a továbbiakban erre az altérre.



## 7.2. Multiplikatív időfejlesztő operátor

A (7.7), (7.10) és (7.11) egyenletek segítségével már tudunk megfelelő multiplikatív klasszikus evolúciós operátort definiálni, amihez olyan súlyfüggvény tartozik, amely a periodikus pályákon kiszámítva a Jacobi mátrix sajátértékét adja. Tekintsük a következő operátort:

$$\mathcal{L}^t(\mathbf{u}', x'; \mathbf{u}, x) = e^{h(x)} \delta(x' - f^t(x)) \frac{\delta(\mathbf{u}' - R^t(x, \mathbf{u}))}{|\Lambda^t(x, \mathbf{u})|^{\beta-1}}, \quad (7.12)$$

ahol  $h$  a pálya egy additív függvénye,  $\beta$  pedig egy paraméter, és  $\mathbf{u}, \mathbf{u}' \in ETM$ .

Az operátor nyomát a következő mindkét változó szerinti integrál adja:

$$\text{Tr } \mathcal{L}^t = \int dx d\mathbf{u} \mathcal{L}^t(\mathbf{u}, x; \mathbf{u}, x).$$

Az  $\int dx$  integrál a (1.29)-(1.35) levezetéshez hasonló manipulációk után a primitív periodikus pályákra ( $p$ ) és repetícióikra ( $r$ ) vett összeg lesz :

$$\begin{aligned} \text{Tr } \mathcal{L}^t &= \sum_p T_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{e^{r h_p} \delta(t - r T_p)}{|\det(1 - \mathbf{J}_p^r)|} \Delta_{p,r}, \\ \Delta_{p,r} &= \int_g d\mathbf{u} \frac{\delta(\mathbf{u} - R^{T_p r}(x_p, \mathbf{u}))}{|\Lambda^{T_p r}(x_p, \mathbf{u})|^{\beta-1}}, \end{aligned} \quad (7.13)$$

ahol  $\mathbf{J}_p$  a periodikus pálya Jacobi mátrixa. Amint most megmutatjuk,  $\Delta_{p,r}$  is kifejezhető a  $p$  periodikus pálya Jacobi mátrixának sajátértékeivel, és független a periodikus pálya  $x_p$  kezdőpontjának választásától.

Amennyiben  $f^t(x)$  egy periodikus pálya  $T$  periódussal, akkor az érintő sokaságban találunk  $d$  periodikus megoldást:

$$\mathbf{e}_i(x(T+t)) = \mathbf{e}_i(x(t)), \quad i = 1, \dots, d,$$

melyek a stabilitási mátrix  $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_d\}$  transzverz sajátvektorai, melyekhez tartozó (7.10) nyújtási faktorok a Jacobi mátrix sajátértékei:

$$\mathbf{J}_p(x) \cdot \mathbf{e}_i(x) = \Lambda_{p,i} \mathbf{e}_i(x), \quad i = 1, \dots, d.$$

A (7.13) egyenletben a  $\int d\mathbf{u}$  integrál ezekből a periodikus megoldásokból vesz fel járulékokat.

Most vizsgáljuk meg az  $i$ . sajátirányhoz tartozó megoldás stabilitását. Ehhez fejtük ki a  $\mathbf{e}_i$  sajátvektortól való kis eltérést a stabilitási mátrix sajátbázisában:  $\delta \mathbf{u} = \sum \delta u_\ell \mathbf{e}_\ell$ . A (7.11) leképezés variációja egy teljes  $t = T$  periódusra vonatkoztatva a következő:

$$\begin{aligned} \delta R^T(\mathbf{e}_i) &= \frac{\mathbf{J} \cdot \delta \mathbf{u}}{g(\mathbf{J} \cdot \mathbf{e}_i)} - \frac{\mathbf{J} \cdot \mathbf{e}_i}{g(\mathbf{J} \cdot \mathbf{e}_i)^2} \left( \frac{\partial g(\mathbf{e}_i)}{\partial \mathbf{u}} \cdot \mathbf{J} \cdot \delta \mathbf{u} \right) \\ &= \sum_{k \neq i} \frac{\Lambda_{p,k}}{\Lambda_{p,i}} \left( \mathbf{e}_k - \mathbf{e}_i \frac{\partial g(\mathbf{e}_i)}{\partial u_k} \right) \delta u_k. \end{aligned} \quad (7.14)$$

A  $\delta u_i$  komponens nem ad járulékot, mivel  $g(\mathbf{e}_i + du_i \mathbf{e}_i) = 1 + du_i$  miatt  $\partial g(\mathbf{e}_i)/\partial u_i = 1$ .

Azonban a  $\delta \mathbf{u}$  infinitezimális variációknak az  $\mathbf{u}$  normáltsága miatt ki kell elégíteniük a

$$g(\mathbf{u} + \delta \mathbf{u}) = g(\mathbf{u}) = 1 \quad \implies \quad \sum_{\ell=1}^d \delta u_\ell \frac{\partial g(\mathbf{u})}{\partial u_\ell} = 0$$

feltételt, így a megengedett variációk alakja:

$$\delta \mathbf{u} = \sum_{k \neq i} \left( \mathbf{e}_k - \mathbf{e}_i \frac{\partial g(\mathbf{e}_i)}{\partial u_k} \right) c_k, \quad |c_k| \ll 1$$

lesz. A  $\mathbf{e}_i$  sajátvektor kis környezetében az  $\int d\mathbf{u}$  integrál kifejezhető mint

$$\int_g d\mathbf{u} = \int \prod_{k \neq i} dc_k.$$

Béírva ezeket a variációkat az  $\int d\mathbf{u}$  integrálba a

$$\begin{aligned} \int_g d\mathbf{u} \quad & \delta(\mathbf{e}_i + \delta \mathbf{u} - R^T(\mathbf{e}_i) - \delta R^T(\mathbf{e}_i) + \dots) \\ &= \int \prod_{k \neq i} dc_k \delta((1 - \Lambda_k/\Lambda_i)c_k + \dots) \\ &= \prod_{k \neq i} \frac{1}{|1 - \Lambda_k/\Lambda_i|} \end{aligned}$$

kifejezést kapjuk, és a trace  $\int d\mathbf{u}$ -hez tartozó része végül a következő lesz:

$$\Delta_{p,r} = \sum_{i=1}^d \frac{1}{|\Lambda_{p,i}^r|^{\beta-1}} \prod_{k \neq i} \frac{1}{|1 - \Lambda_{p,k}^r/\Lambda_{p,i}^r|}. \quad (7.15)$$

### 7.2.1. A spektráldetermináns

A trace ismeretében a spektráldetermináns már az (1.39) és az (1.38)-nál ismertetett módon meghatározható. Konkrétan, a trace Laplace transzformáltja:

$$\text{Tr } \mathcal{L}(s) = \int_{0_+}^{\infty} dt e^{st} \text{Tr } \mathcal{L}(t),$$

és ez nem más mint a spektráldetermináns logaritmikus deriváltja:  $\text{Tr } \mathcal{L}(s) = -\frac{d}{ds} \log Z(s)$ , ahol a spektráldetermináns

$$Z(\beta, s) = \exp \left( - \sum_{p,r} \frac{e^{(h_p + sT_p)r}}{r |\det(1 - \mathbf{J}_p^r)|} \Delta_{p,r}(\beta) \right) \quad (7.16)$$

alakú. Az így kapott spektráldeterminánsból az operátor sajátértékei a szokásos kummuláns kifejtés segítségével már megkaphatók.

A szemiklasszikus kvantálás spektráldeterminánsával az új operátor úgy hozható kapcsolatba, ha a benne szereplő  $\beta$  értékét és a  $h$  súlyfüggvényt illetve  $s$ -et a

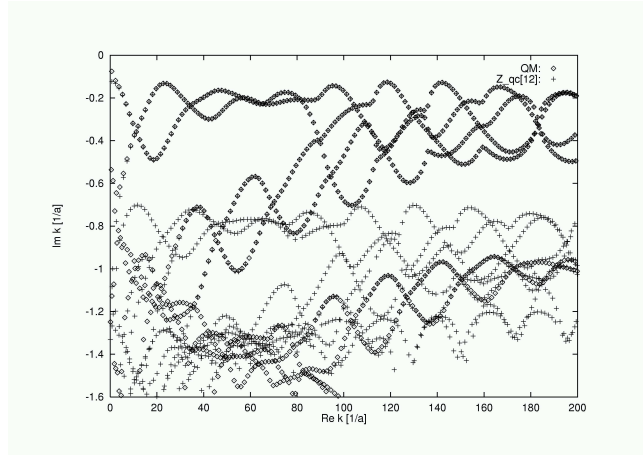
$$\beta = 1/2, \quad h_p = iS_p/\hbar + i\nu_p\pi/2, \quad s = 0 \quad (7.17)$$

módon választjuk meg, ahol  $S_p$  a periodikus pálya hatása,  $\nu_p$  pedig a Maslov index. Például, a legegyszerűbb kétdimenziós hiperbolikus Hamiltoni mechanikai rendszerek esetén a Jacobi mátrix sajátértékei valósak, egymás reciprokai  $\Lambda_1 = 1/\Lambda_2 = \Lambda$ , és a spektráldetermináns a

$$\begin{aligned} Z_\sigma(\beta, s) &= \exp \left( - \sum_{p,r} \frac{\sigma_p^r}{r |\Lambda_p^r|} \frac{e^{r(iS_p/\hbar + i\nu_p\pi/2 + sT_p)}}{(1 - 1/\Lambda_p^r)^2} \Delta_{p,r}(\beta) \right) \\ \Delta_{p,r}(\beta) &= \frac{|\Lambda_p^r|^{-\beta+1}}{1 - 1/\Lambda_p^{2r}} + \frac{|\Lambda_p^r|^{\beta-3}}{1 - 1/\Lambda_p^{2r}} \end{aligned} \quad (7.18)$$

alakot veszi fel, ahol bevezettük a sajátérték előjelét, mivel  $\sigma = \Lambda/|\Lambda|$  mert  $Z_-$ , és  $Z_+$  hasznos lesz a továbbiakban. A kétdimenziós rendszerekre vonatkozó szemiklasszikus (1.80) spektráldetermináns felírható ezeknek az újonnan bevezetett spektráldeterminánsoknak a segítségével a

$$Z_{sc}(E) = \frac{Z_+(\frac{1}{2}, E) Z_-(\frac{7}{2}, E)}{Z_-(\frac{3}{2}, E) Z_+(\frac{5}{2}, E)}, \quad (7.19)$$

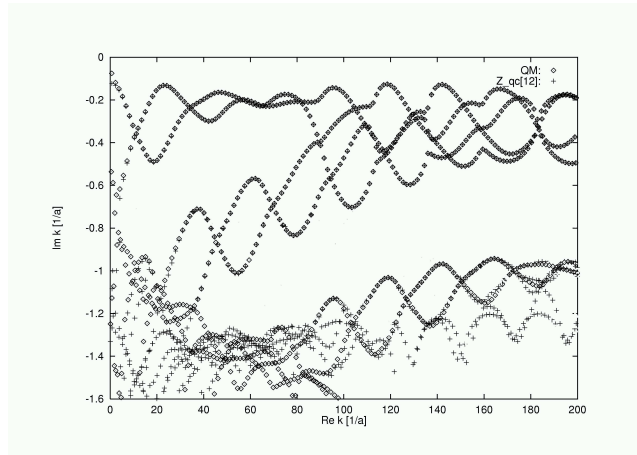


7.2. ábra: A  $Z_+(\frac{1}{2}, E)Z_-(\frac{7}{2}, E)$  zérushelyei a komplex hullámszám síkon az  $R : a = 6 : 1$  három diszk rendszerre. Látható hogy a 7.1. ábrán talált szemiklasszikus zérushelyeken túl számos új zérushely is megjelenik. A 7.1. ábrán végzett számítással ellentétben itt nem lépnek fel a pólusoknak megfelelő hamis zéróhelyek a spektráldetermináns holomorfitása miatt.

alakban, ahol  $Z_\sigma$  kiszámításakor a (7.18) beli  $\Delta_{p,r}$  összegben csak az első tagot vesszük figyelembe.

Mivel a  $Z_\sigma$  spektráldeterminánsok olyan klasszikus, multiplikatív súlyfüggvénnyel rendelkező operátorokból származtathatók melyek kielégítik a [Rugh 1992]-ben talált feltételeket, ezért holomorfak. A (7.19) előállítás azt bizonyítja, hogy a szemiklasszikus spektráldetermináns meromorf., mivel a nevező zérushelyei egyben a  $Z_{sc}$  pólusai. Azonban a szemiklasszikus zérókat (7.19) ismeretében meghatározhatjuk a számláló zérushelyeiből csupán holomorf spektráldeterminánsokat használva.

A 7.2. ábrán a  $Z_+(\frac{1}{2}, E)Z_-(\frac{7}{2}, E)$  zérushelyeit mutatjuk a komplex hullámszám síkon a standard három diszk rendszer esetén. A spektráldetermináns kummuláns sora – a [Rugh 1992] eredmény alkalmazhatóságát alátámasztva – super-exponenciálisan konvergált, és nem léptek fel a szemiklasszikus számítás hamis zérói. Azonban számos új zéró jelent meg, melyek nem igazi szemiklasszikus zérók, de nem is a pólusokból származó hamis zérók. Ezek olyan zérók, melynek a (7.19) nevezőjének is zérói és a (7.19) hányadosból kiesnek. Ezt úgy demonstrálhatjuk, ha kiszámítjuk a nevező zérushelyeit, és amelyek numerikus pontosságon belül megegyeznek a szám-



7.3. ábra: A 7.2. ábra a (7.19) nevezőjének zérushelyei eltüntetése után. Láthatjuk, hogy csak a 7.1. ábrán látható szemiklasszikus zérushelyek maradnak. Azonban az  $\text{Im}k \approx -1$  nél jelentkező hamis zérók itt már nem lépnek fel.

láló zérushelyeivel, azokat levesszük a 7.2. ábráról. Így módon jutunk a 7.3 ábrához. Látható, hogy ilyen módon minden igazi szemiklasszikus zérót helyesen kapunk vissza, és a pólusból származó hamis zérók is eltűnnek.

### 7.3. Összefoglalás

Ebben a fejezetben egy új, tisztán klasszikus operátort vezetünk be, melynek spektráldeterminánsából a szemiklasszikus spektráldetermináns kifejezhető egy hányados alakjában. A klasszikus operátor kummuláns sorának superexponenciális konvergenciáját, és a hányados előállítást kihasználva meghatározhatjuk a három diszk rendszer esetén a szemiklasszikus rezonanciákat a komplex sík olyan területein is, ahol az eredeti szemiklasszikus spektráldetermináns kummuláns kifejtése már nem abszolút konvergens. A hányados előállítás a szemiklasszikus spektráldetermináns analitikus folytatásának is tekinthető.



## 8. Fejezet

# Összefoglalás és tézisek

A statisztikus fizika egyik leggyorsabban fejlődő területe a komplex rendszerek kutatása. A komplexitás egyik forrása a rendszer dinamikájának komplikáltsága, az ún. dinamikai káosz. A kaotikus dinamika statisztikus leírásának egyik hatékony módszere a periodikus pálya elmélet, mely a fizikai mennyiségek átlagát és eloszlását a rendszer periodikus pályáira vett összegek segítségével állítja elő. A periodikus pályák a klasszikus dinamika vázát alkotják, az ezekre alapozott leírást először Poincaré javasolta. A periodikus pályák a statisztikus mechanikai mikroállapotokkal, a periodikus pálya összegek pedig a Boltzman állapotösszegekkel analóg helyet foglalnak el a kaotikus dinamikai rendszerek Bowen, Ruelle, Smale és Sinai által kifejlesztett termodinamikai formalizmusában.

A periodikus pálya elmélet fontos szerepet játszik egyes mezoszkopikus rendszerek transzport tulajdonságainak megértésében is. Az utóbbi két évtizedben a nanotechnológiában elért fejlődés lehetővé tette, hogy olyan néhány száz nanométer kiterjedésű, nagy tisztaságú mintákat, ún. nanostruktúrákat hozzanak létre, melyekben a vezetés effektíve két dimenzióban megy végbe, és az elektronok fáziskohereus szabad úthossza sokkal nagyobb a minta méreteinél. A már nem, vagy csak gyengén kölcsönható effektív elektronok hullámhossza sokkal kisebb a minta méreteinél, ezért jól leírhatók szemiklasszikus módszerekkel, melyek az elektronok pályáit klasszikusnak tekintik, de korrekt módon figyelembe veszik a fáziskoherenciát és a belőle fakadó interferencia effektusokat. A nanostruktúrákban az elektronok klasszikus mozgása tipikusan kaotikus, ezért az ismert egydimenziós szemiklasszikus módszerek helyett általánosan érvényes módszert kell alkalmazni.

A klasszikusan kaotikus rendszerek kvantummechanikai megfelelőinek sze-

miklasszikus kvantálását a Gutzwiller trace formula adja meg, mely a rendszer állapotosságát a klasszikus rendszer periodikus pályáira vett összeg alakjában állítja elő, ezért a klasszikus periodikus pályák periódusideje, a pályák mentén számított klasszikus hatás és a pályák stabilitását jellemző Ljapunov exponensek megjelennek a mezoszkopikus rendszer konduktanciájának fluktuációiban is, és fontos szerepet kapnak egyes kísérleti eredmények interpretálásában.

A periodikus pálya elméletet, mint a legelterjedtebb többdimenziós szemiklasszikus módszert, kiterjedten alkalmazzák az atomok és molekulák fizikájában, és számos alkalmazása ismert olyan hullámjelenségeknél is, amikor a hullámhosszak rövidek az adott rendszer geometriai méreteihez képest, mint például egyes akusztikai, rugalmassági, hidrodinamikai és optikai problémákban.

A szemiklasszikus periodikus pálya összegek formailag és elvileg is nagyban hasonlítanak a kaotikus rendszerek termodinamikai formalizmusa során bevezetett összegekhez, és sok szempontból párhuzamosan tárgyalhatók. Az egyik területen elért eredmények könnyen átvihetők vagy általánosíthatók a másik esetre. Ez indokolja, hogy a periodikus pályákra alapozott leírás önálló módszerként is megjelenjen a fizika matematikai eszköztárában.

A Gutzwiller által 1967 és 1971 között a Feynman féle pályaintegrálból levezetett, aszimptotikusan a vezető rendjében érvényes szemiklasszikus propagátort, Green függvényt és állapotosságát a nyolcvanas években kezdték konkrét számítások végzésére használni, mivel a gyakorlatban nagyszámú klasszikus periodikus pálya adatait kell numerikusan meghatározni. A kilencvenes évek elejére világossá váltak a módszer előnyei, például az, hogy a naív fizikai intuícióval szemben viszonylag jól működik az alapállapot közelében is és jól adja vissza a kvantummechanikai spektrum számos statisztikai tulajdonságát és az energiaszintek korrelációit. Azonban az is világossá vált, hogy az egyes energiaszintek precíz meghatározásához és mélyebb kvantumos effektusok leírásához javítani kell a módszer pontosságán.

Az elvégzett kutatómunka célkitűzése a vezető renden túli különböző fajta kvantum korrekciók megkeresése, módszerek kidolgozása ezek kezelésére és a nyert eredmények alkalmazása volt.



## 8.1. Az alkalmazott módszerek

A propagátor szemiklasszikus határesetben érvényes alakja a Feynman pálya-integrálból kapható a nyeregpont (stacionárius fázis) módszer segítségével. Idő szerinti Fourier transzformáltja a szemiklasszikus Green függvény. A periodikus pálya elmélet alapját jelentő Gutzwiller trace formulát ebből nyom képzés után nyerjük.

A trace formula korrekciói három különböző forrásból erednek. Az első fajta korrekció abból ered, hogy a Feynman pályák hatásfüggvényének nem csak olyan pályáknál van szélsőértéke, amelyekre a hatás variációja eltűnik, hanem ott is, ahol a hatás azért minimális, mert szingularitások vagy geometriai akadályok akadályozzák a további minimalizálást. A szingularitások vagy akadályok jelenléte diffrakciót okoz. A diffrakció J. B. Keller által bevezetett geometriai elmélete ezekben az esetekben is megadja a helyes szemiklasszikus közelítést, de a hagyományos newtoni mechanikát diffraktív pályákkal egészíti ki, melyek szabadon választhatnak mozgásirányt a diffraktív pontokban, melyek olyan pontok, ahol a newtoni mechanika nem egyértelmű. A szemiklasszikus Green függvényt a diffrakciós tagokkal kiegészítve az értekezésben levezetem a trace formula diffrakciós korrekcióit, melyek a diffraktív periodikus pályákra vett összegek. Az így nyert trace formulából meghatározom a szemiklasszikus spektráldeterminánst, melynek zérói az energiaszintek vagy a szórési rezonanciák. Az eredményeket az irodalomban szokásos példákon (két- és három diszkból álló szóró rendszer, Sinai billiárd) tesztelem.

A diffraktív periodikus pályák jelenlétét Fermi hullámszám szerinti Fourier transzformálás segítségével tanulmányozom normál, majd normál-szupravezető nanostruktúrák konduktanciáját meghatározó reflexiós és transzmissziós S-mátrix elemekben. A pályák hosszát a „Path Length Spectrum”-nak nevezett teljesítmény spektrumban megjelenő csúcsok segítségével határozom meg. Szupravezető jelenléte esetén az Andreev reflexió okozta fázis fordítás azt eredményezi, hogy negatív hosszúságú elektron és lyuk szakaszokat egyaránt tartalmazó diffraktív pályák is megjelennek. A diffraktív pályák hatását végül a konduktancia lépcsők lekopásában és a konduktancia átlagos viselkedésében is kimutatom. A trace formula második fajta korrekciói lényegében perturbatív korrekciók, melyek hasonlóak a szokásos nyeregpont integrálokban fellépő Gauss integrálok korrekcióinál megszokottakhoz. Azonban a Feynman pálya integrál esetén a végtelen dimenziós integrálok és a diszkrétizálással kapcsolatos határátmenetek a korrekciók számítását nehezen áttekinthetővé teszik. Ezért olyan módszert dolgoztam ki, amely a

korrekciók meghatározását pálya integrálok helyett közönséges differenciálegyenletek megoldására vezeti vissza. Az időfüggő Schrödinger egyenlethez olyan lokális megoldásokat konstruálok, melyek fázisai és amplitúdói a periodikus pályáktól való eltérések szerint analitikusan kifejtethetők. A kifejtési együtthatókra időfüggő differenciálegyenleteket kapok. A szemiklasszikus megoldás megkeresése után a korrekciókat perturbatív módon kapom meg. Perturbatíván megkeresem a lokális sajátfüggvényeket és sajátértékeket, belőlük megkonstruálok a lokális majd a teljes spektráldeterminánst. A módszer eredményeit összehasonlítom a Feynman pályaintegrálból hagyományos nyeregpontra korrekcióval nyert eredményekkel.

A levezetés során kiderül, hogy a kvantum korrekciók számítása teljesen analóg egy Gauss zajnak kitett kaotikus rendszer spektráldeterminánssal zaj korrekció számításával. Mivel a zaj korrekciók kiszámítása technikailag egyszerűbb feladat, a magas rendű korrekciókat egy zajos kaotikus repellor esetén tanulmányozom. A nyeregpontra módszert a korrekció rendjének végtelenhez vitele mellett alkalmazva, trace formulát vezetek le a magas rendű korrekciók asszimptotikus viselkedésére.

Végül harmadik fajta trace formula korrekcióként egy a szemiklasszikus spektráldetermináns kumuláns sorfejtésének konvergenciáját gyorsító módszert adok, ami egy új elven, a klasszikus operátor érintő térbe való kiterjesztésén alapul.

## 8.2. Tézisek és elhelyezkedésük az értekezésben

Alább felsorolom az értekezés téziseit és az ábrák, táblázatok és képletek referenciáinak megjelölésével utalok a dolgozat azon helyeire, melynek *közelében* azok megtalálhatók. A tézisek után feltüntetem azt az egy-egy referált munkákat, ahol a tézispont konkrét állítása publikálásra került.

1, Bevezettem a diffraktív periodikus pályák fogalmát (2.12) és megadtam a szemiklasszikus trace formulához (2.13) és a spektráldeterminánshoz ((2.18) és (2.19)) adott járulékokat. Az új formulák segítségével szemiklasszikus közelítést adtam a két-diszk rendszer olyan rezonanciáihoz is, melyekhez a Gutzwiller trace formula önmagában nem ad közelítést (2.3. ábra). Publikálva: G. Vattay, A. Wirzba and P.E. Rosenqvist, Phys. Rev. Lett. **73**, 2304 (1994),

2, A három-diszk szórás rezonanciái (1.9. és 2.5. ábra) és a kis diszk rádiuszú Sinai biliárd energiaszintjei ((2.48) és 2.8. ábra) példáján meg-

mutattam, hogy az új diffraktív trace formula alkalmas diffraktív szórást is tartalmazó kaotikus rendszerek spektrumának szemiklasszikus közelítésére. Publikálva: P. E. Rosenqvist, G. Vattay, A. Wirzba, J. Stat. Phys. **83**, 243–257 (1996) és P. Dahlqvist and G. Vattay, J. Phys. A **31**, 6333 (1998)

3, Megadtam a mezoszkopikus vezetők transzmissziós és reflexiós mátrix-elemeinek diffraktív pályákból származó járulékát ((3.23) és (3.24)) szemiklasszikus közelítésben. Kimutattam ezen diffrakciós járulékokat a pontszerű szennyezést tartalmazó ((3.37) és (3.39)) ill. a szögben megtört vezető cső úthossz-spektrumában (3.6. ábra). Publikálva: G. Vattay, J. Cserti, G. Palla and G. Szálka, Chaos Solitons and Fractals **8**, 1031 (1997)

4, Megmutattam, hogy az Andreev reflexió negatív hosszúságú diffraktív pályákat hoz létre normál-szupravezető nanostruktúrákban (4.5). Ezek jelenlétét kimutattam a pontszerű szennyeződést tartalmazó normál-szupravezető vezető cső úthossz spektrumában (4.7. és 4.6. ábrák). Publikálva: J. Cserti, G. Vattay, J. Koltai, F. Taddei, C. J. Lambert, Phys. Rev. Lett. **85**, 3704 (2000)

5, A Schrödinger egyenlet periodikus pályák környezetében vett analitikus sorfejtésén alapuló új módszert dolgoztam ki ((5.3)-(5.23)) a Gutzwiller trace formula ill. a szemiklasszikus spektráldetermináns  $\hbar$  korrekcióinak kiszámítására. Megmutattam, hogy a korrekciók kiszámítása egy Gauss zajjal perturbált dinamikai rendszer korrekcióinak kiszámításával analóg ((5.7)-(5.12)). Publikálva: G. Vattay and P.E. Rosenqvist, Phys. Rev. Lett. **76**, 335 (1996)

6, A Gauss zajjal perturbált egydimenziós leképezések trace formuláihoz tartozó zaj korrekciók kiszámítására a periodikus pályák körüli analitikus bázison alapuló új módszert dolgoztam ki ((6.28)-(6.61)). Egy egydimenziós repellor esetén kimutattam a módszer hatékonyságát a korábban használt perturbációs gráf technikához képest (6.1. rész és a tabPert. táblázat). Publikálva: P. Cvitanović, N. Sondergaard, G. Palla, G. Vattay, C. P. Dettmann, Phys. Rev. E **60**, 3936 (1999)

7, Új trace formulát vezettem le, amely megadja a magas rendű zaj korrekciók aszimptotikus viselkedését egydimenziós leképezésekben (6.108). Az új trace formula egy az eredeti leképezésből generált kétdimenziós leképezés ((6.83) és (6.84)) periodikus pályáit tartalmazza. Publikálva: G. Palla, G. Vattay and A. Voros, Phys. Rev. E **64**, 012104 (2001)

8, A dinamikai rendszerek fázissterének kiterjesztésével olyan új klasszikus operátort vezettem be (7.12), melynek spektruma tartalmazza a Gutzwiller féle szemiklasszikus sajátértékeket (7.19). Megmutattam, hogy a hozzá tar-

tozó kumuláns sorfejtés szuper-exponenciálisan csökken „Axiom A” dinamikai rendszerekben. Megmutattam, hogy a három-diszk rendszerben ez lehetővé teszi a szemiklasszikus rezonanciák meghatározását a komplex hullámszám síkon a Voros féle szemiklasszikus spektráldetermináns konvergencia tartományán túl is (7.2. és 7.3. ábrák). Publikálva: P. Cvitanović and G. Vattay, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 4138, (1993); G. Vattay, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **116**, 251 (1994) és P. Cvitanović, G. Vattay and A. Wirzba, *Lecture Notes in Physics* **485** (1997)

# Irodalomjegyzék

- [Abramowitz, Stegun 1972] M. Abramowitz and I. A. Stegun  
*Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables*  
Dover, New York (1972)
- [Adagideli, Goldbart 2001] I. Adagideli and P. M. Goldbart  
cond-mat/0108102
- [Agam 1995] O. Agam  
*Non-Universal Properties of Chaotic Systems*  
Research Thesis, Technion University, Haifa (1995)
- [Agam, Fishman 1996] O. Agam, S. Fishman  
*Periodic orbits analysis of the form factor: From ballistic to diffusive systems*  
Journal of Physics A **29**, 2013-2038 (1996)
- [Agam, Fishman 1997] O. Agam, S. Fishman  
*Spectral Statistics of Chaotic and Disordered Systems*  
Classical, Semiclassical and Quantum Dynamics in Atoms  
in Lecture Notes in Physics **485**, 153, Springer-Verlag (1997)
- [Agam, Andreev, Simons 1997] O. Agam, A.V. Andreev and B.D. Simons  
Chaos Solitons and Fractals **8**, 1099, (1997)
- [Alonso, Gaspard 1993] D. Alonso and P. Gaspard  
 *$\hbar$  expansion for the periodic orbit quantization of chaotic systems*  
Chaos **3**, 601 (1993);  
P. Gaspard  
Prog. Theor. Phys. Suppl. **116**, 59 (1994)

- [Alonso, Gaspard 1994] D. Alonso and P. Gaspard  
*Erratum:  $\hbar$  expansion for the periodic orbit quantization of chaotic systems*  
 Chaos **4**, 105 (1994)
- [Argaman 1996] N. Argaman  
*Semiclassical analysis of mesoscopic devices*  
 Physical Review B **53**, 7035 (1996)
- [Andreev 1964] A.F. Andreev  
 Zh. Eksp. Teor. Fiz. **46**, 1823 (1964)  
 Sov. Phys. JETP, **19**, 1228 (1964)
- [Andreev, Altshuler 1995] A. V. Andreev and B. L. Altshuler  
 Phys. Rev. Lett. **75**, 902 (1995)
- [Arnold 1978] V.I. Arnold  
*Ordinary Differential Equations*  
 MIT Press, Cambridge, Mass. (1978)
- [Artuso, Aurell, Cvitanović 1990] R. Artuso, E. Aurell and P. Cvitanović  
*Recycling of strange sets*  
 Nonlinearity **3**, 325 (1990); **3** 361 (1990)
- [Babic, Buldyrev 1990] V. M. Babić and V. S. Buldyrev  
*Short Wavelength Diffraction Theory*  
 Springer-Verlag, New York (1990)
- [Bagwell et al. 1990] P. Bagwell  
 Phys. Rev. **B41**, 10354 (1990);  
 A. Kumar, P. Bagwell  
 Phys. Rev. B **43**, 9012 (1991);  
 S. Chaudhuri, S. Bandyopadhyay, M. Cahay,  
 Phys. Rev. B **45**, 11126 (1992);  
 C. S. Chu, R. S. Sorbello  
 Phys. Rev. B **40**, 5941 (1989);  
 H. Ishio, J. Burgdörfer  
 Phys. Rev. B **51**, 2013 (1995);  
 P. Exner, P. Šeba,  
*cond-mat/9607016*;

P. Exner, R. Gawlista, P. Šeba, M. Tater  
*cond-mat/9607017*;  
Th. M. Nieuwenhuizen, A. Lagendijk, B. A. Tiggelen  
Phys. Lett. A **169**, 191 (1992);  
T. Shigehara  
Phys. Rev. E **50**, 4357 (1994);  
A. Mosk, Th. M. Nieuwenhuizen, C. Barnes  
*cond-mat/9601038*

[Balian, Bloch 1970] R. B. Balian and C. Bloch  
Ann. Phys. (New York) **60**, 401 (1970)

[Balian, Bloch 1971] R. B. Balian and C. Bloch  
Ann. Phys. (New York) **63**, 592 (1971)

[Balian, Bloch 1974] R. Balian and R. Bloch  
Ann. Phys. (New York) **85**, 514 (1974)

[Baranger, Stone 1989] H. Baranger and D. Stone  
Phys. Rev. **B40**, 8169 (1989)

[Baranger, Jalabert, Stone 1993] H. U. Baranger, R. A. Jalabert, and A. D. Stone  
Chaos **3**, 665 (1993)

[Bauch et al. 1998] S. Bauch, A. Bledowski, L. Sirko, P. M. Koch, R. Blümel  
*Signature of non-Newtonian orbits in ray-splitting cavities*  
Physical Review E **57**, 304 (1998)

[Beenakker, Houten 1991] C. W. Beenakker, H. van Houten  
in Solid State Physics, edited by H. Ehrenreich and D. Turnbull  
Academic Press, New York **44**, pp. 1-228 (1991)

[Beenakker 1995] C. W. J. Beenakker  
in Mesoscopic Physics, Les Houches Summer School  
edited by E. Akkermans, G. Montambaux, J. L. Pichard, and J. Zinn-Justin  
Elsevier Science B. V., Amsterdam (1995).

[Beenakker 1997] C. W. J. Beenakker  
Rev. Mod. Phys. **69**, 731 (1997)

- [Bene 1989] J. Bene  
*Multifractal properties of a class of non-natural measures as an eigenvalue problem*  
 Phys. Rev. A **39**, 2090 (1989)
- [Bene, Szépfalusy 1988] J. Bene and P. Szépfalusy  
 Phys. Rev. A **37**, 871 (1988)
- [Bennettin, Galgani, Strelcyn 1980] G. Bennettin, L. Galgani and J.-M. Strelcyn  
*Lyapunov characteristic exponents for smooth dynamical systems and for Hamiltonian systems: a method for computing all of them*  
 Meccanica **15**, 9 (1980).
- [Berry, Tabor 1974] M. V. Berry and M. Tabor  
 Proc. R. Soc. Lond. A **349**, 101 (1974)
- [Berry 1981] M. V. Berry  
 Ann. Phys. N.Y. **131**, 163 (1981)
- [Berry, Keating 1991] M. V. Berry and J. P. Keating  
 J. Phys. **A23**, 4839 (1991)
- [Biham, Wenzel 1989] O. Biham and W. Wenzel  
 Phys. Rev. Lett. **63**, 819 (1989)
- [Biham, Wenzel 1990] O. Biham and W. Wenzel  
 Phys. Rev. A **42**, 4639 (1990)
- [Biham, Kvale 1992] O. Biham and M. Kvale  
 Phys. Rev. A **46**, 6334 (1992)
- [Bochner, Martin 1948] S. Bochner and W. T. Martin  
*Several Complex Variables* Chapter 2, page 33, formula 14  
 Princeton University Press (1948).
- [Bogomolny, Leboeuf, Schmit 2000] E. Bogomolny, P. Leboeuf, C. Schmit  
*Spectral statistics of chaotic systems with a pointlike scatterer*  
 Phys. Rev. Lett. **85**, 2486 (2000)



- [Bogomolny, Giraud, Schmit 2001] E. Bogomolny, O. Giraud and C. Schmit  
*Periodic orbits contribution to the 2-point correlation form factor for pseudo-integrable systems*  
 Commun. Math. Phys. **222**, 327 (2001)
- [Bohigas, Giannoni 1984] O. Bohigas and M.-J. Giannoni  
 in *Mathematical and Computational Methods in Nuclear Physics*  
 ed.: J. Desha, J. M. Gomez and A. Polls  
 Lecture Notes in Physics **209**  
 Springer-Verlag, Berlin (1984)
- [Bowen 1975] R. Bowen  
*Equilibrium states and the ergodic theory of Anosov-diffeomorphisms*  
 Springer Lecture Notes in Math. **470** (1975)
- [Bulgac, Magierski 2001] A. Bulgac, P. Magierski  
*Quantum corrections to the ground state energy of inhomogeneous neutron matter*  
 Nucl. Phys. A **683**, 695 (2001)
- [Bulgac, Wirzba 2001] A. Bulgac, A. Wirzba  
*Casimir interaction among object immersed in a fermionic environment*  
 Phys. Rev. Lett. **87**, 120404 (2001)
- [Bunimovich, Sinai 1980] L. Bunimovich and Ya.G. Sinai  
*Comm. Math. Phys.* **78**, 247 (1980);  
**78**, 479 (1980);  
*Erratum*, *ibid.* **107**, 357 (1986)
- [Buslaev 1963] V. B. Buslaev  
 Sov. Phys. Doklady **7** 685 (1963)
- [Büttiker 1986] M. Büttiker  
 Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986)
- [Catini et al.] J.P. Carini, J. T. Londergan, K. Mullen, D. P. Murdock  
 Phys. Rev. B **48**, 4503 (1993);  
 Y. Avishai, D. Bessis, B. G. Giraud, G. Mantica  
 Phys. Rev. B **44**, 8028 (1991)

- [Classical and Quantum Chaos] P. Cvitanović, R. Artuso, R. Mainieri, G. Vattay, G. Tanner  
*Classical and Quantum Chaos*  
 Niels Bohr Institute, Copenhagen (1996-2001)  
<http://www.complex.elte.hu/~vattay/book.html>
- [Creagh, Dimon 1997] S. C. Creagh, P. Dimon  
*Geometrical orbits in the power spectra of waves*  
 Phys. Rev. E **55**, 5551 (1997)
- [Cserti, Szálka, Vattay 1997] J. Cserti, G. Szálka and G. Vattay  
*Conductance in a periodically doped quantum wire*  
 Proceedings of the ICSP, Wien (1997)
- [Cserti, Szálka, Vattay 1998] J. Cserti, G. Szálka, and G. Vattay  
*Crossover from regular to chaotic behaviour in the conductance of periodic quantum chains*  
 Phys. Rev. B **57**, R15092 (1998)
- [Cserti, Vattay, Koltai, Taddei, Lambert 2000] J. Cserti, G. Vattay, J. Koltai, F. Taddei, C. J. Lambert  
*Negative length orbits in normal-superconductor billiard systems*  
 Phys. Rev. Lett. **85**, 3704 (2000)
- [Cvitanović, Eckhardt 1989] P. Cvitanović, B. Eckhardt  
 Phys.Rev.Lett.**63**, 823 (1989)
- [Cvitanović, Eckhardt 1991] P. Cvitanović, B. Eckhardt  
*Periodic orbit expansions for classical smooth flows*  
 J. Phys. A **24**, L237 (1991)
- [Cvitanović, Rosenqvist 1992] P. Cvitanović and P.E. Rosenqvist  
*A new determinant for quantum chaos*  
 Proc. SISSA Trieste workshop *From Classical to Quantum Chaos*  
 (1992)
- [Cvitanović, Rosenqvist, Vattay, Rugh 1993] P. Cvitanović, P. E. Rosenqvist, G. Vattay and H. H. Rugh  
*A Fredholm Determinant for Semi-classical Quantization*  
 CHAOS **3**, 619 (1993)

- [Cvitanović, Vattay 1993] P. Cvitanović and G. Vattay  
*Entire Fredholm determinants for Evaluation of Semi-classical and Thermodynamical Spectra*  
 Phys. Rev. Lett. **71**, 4138, (1993)
- [Cvitanović, Eckmann, Gaspard 1995] P. Cvitanović, J.-P. Eckmann and P. Gaspard  
 Chaos, Solitons and Fractals **6**, 113 (1995)
- [Cvitanović, Dettmann, Mainieri, Vattay 1998] P. Cvitanović, C. P. Dettmann, R. Mainieri, G. Vattay  
*Trace formulas for stochastic evolution operators: Weak noise perturbation theory*  
 J. Stat. Phys. **93**, 981 (1998)
- [Cvitanović, Hansen, Rolf, Vattay 1998] P. Cvitanović, K. Hansen, J. Rolf, G. Vattay  
*Beyond the periodic orbit theory*  
 Nonlinearity **11**, 1209 (1998)
- [Cvitanović, Dettmann, Mainieri, Vattay 1999] P. Cvitanović, C. P. Dettmann, R. Mainieri, G. Vattay  
*Trace formulas for stochastic evolution operators: Smooth conjugation method*  
 Nonlinearity **12**, 939 (1999)
- [Cvitanović, Sondergaard, Palla, Vattay, Dettmann 1999(2)] P. Cvitanović, N. Sondergaard, G. Palla, G. Vattay, C. P. Dettmann  
*Spectrum of stochastic evolution operators: Local matrix representation approach*  
 Phys. Rev. E **60**, 3936 (1999)
- [Cvitanović, Vattay, Wirzba 1997] P. Cvitanović, G. Vattay and A. Wirzba  
*Quantum Fluids and Classical Determinants*  
 Lecture Notes in Physics **485**, ed.: H. Friedrich and B. Eckhardt  
 Springer-Verlag, Berlin (1997)
- [Dahlqvist 1997] P. Dahlqvist  
 J. Phys. A **30**, L351 (1997)

- [Dahlqvist, Vattay 1998] P. Dahlqvist and G. Vattay  
*Periodic orbit quantization of the Sinai billiard in the small scatterer limit*  
 J. Phys. A **31**, 6333 (1998)
- [Dahlqvist 1999(1)] P. Dahlqvist  
 Phys. Rev. E **60**, 6639 (1999)
- [Dahlqvist 1999(2)] P. Dahlqvist  
*From chaotic to disordered systems - a periodic orbit approach*  
 J. Phys. A **32**, 725 (1999)
- [Dando, Monteiro, Owen 1998] P. A. Dando, T. S. Monteiro, S. M. Owen  
*Periodic orbit theory for Rydberg atoms in external fields*  
 Phys. Rev. Lett. **80**, 2797 (1998)
- [Diffraktív periodikus pályák biliárdokban]  
 N. Pavloff, C. Schmit  
*Diffractional orbits in quantum billiards*  
 Physical Review Letters **75**, 61-64 (1995)
- N. D. Whelan  
*Geometric and diffractive orbits in the scattering from confocal hyperbolas*  
 Physical Review E **51**, 3778-3781 (1995)
- Y. Shimizu, A. Shudo  
 Chaos Solitons and Fractals **5**, 1337-1362 (1995)
- U. Smilansky  
*Semiclassical Quantization of Chaotic Billiards - A Scattering Approach*  
 in Mesoscopic Quantum Physics  
 NATO ASI series Les Houches session LXI., Course **7**, 373 Elsevier  
 (1995)
- C. Pisiani  
*Exploring periodic orbit expansions and renormalisation with the*

*quantum triangular billiard*  
Annals of Physics **251**, 208-265 (1996)

U. Smilansky, I. Ussishkin  
*The smooth spectral counting function and the total phase shift for quantum billiards*  
Journal of Physics A **29**, 2587-2597 (1996)

S. Fishman, B. Georgeot, R. E. Prange  
*Fredholm method for scars*  
Journal of Physics A **29**, 919-937 (1996)

H. Bruus, N. D. Whelan  
*Edge diffraction, trace formulae and the cardioid billiard*  
Nonlinearity **9**, 1023-1047 (1996)

N. D. Whelan  
*Semiclassical quantization using diffractive orbits*  
Physical Review Letters **76**, 2605-2608 (1996)

R. Blumel, T. M. Antonsen, B. Georgeot, E. Ott, R. E. Prange  
*Ray splitting and quantum chaos*  
Physical Review Letters **76**, 2476-2478 (1996)

H. Primack, H. Schanz, U. Smilansky, I. Ussishkin  
*Penumbra diffraction in the quantization of dispersing billiards*  
Physical Review Letters **76**, 1615-1618 (1996)

H. Primack, H. Schanz, U. Smilansky, I. Ussishkin  
*Penumbra diffraction in the semiclassical quantization of concave billiards*  
Journal of Physics A **30**, 6693-6723 (1997)

M. Brack, R. K. Bhaduri  
*Semiclassical Physics*

Addison-Wesley Publishing Company (1997)

A. Backer, H. R. Dullin

*Symbolic dynamics and periodic orbits for the cardioid billiard*

Journal of Physics A **30**, 1991-2020 (1997)

N. C. Snaith, D. A. Goodings

*Semiclassical approximations to diffractive effects in the annulus billiard*

Physical Review E **55**, 5212-5224 (1997)

H. Primack

*"Quantal and Semiclassical Analysis of the Three-Dimensional Sinai Billiard"*

PhD Thesis, The Weizmann Institute, Rehovot (1997)

M. Sieber, N. Pavloff, C. Schmit

*Uniform approximation for diffractive contributions to the trace formula in billiard systems*

Physical Review E **55**, 2279-2299 (1997)

C. P. Dettmann, G. P. Morriss

*Stability ordering of cycle expansions*

Physical Review Letters **78**, 4201-4204 (1997)

Y. Decanini, A. Folacci, E. Fournier, P. Gabrielli

*Exact S-matrix for N-disc systems and various boundary conditions:*

*I. Generalization of the Korringa-Kohn-Rostsker- Berry method*

Journal of Physics A **31**, 7865-7889 (1998)

Y. Decanini, A. Folacci., E. Fournier, P. Gabrielli

*Exact S-matrix for N-disc systems and various boundary conditions:*

*II. Determination and partial classification of resonances*

Journal of Physics A **31**, 7891-7900 (1998)

R. W. Robinett

*Periodic orbit theory analysis of a continuous family of quasi-circular billiards*

Journal of Mathematical Physics **39**, 278-298 (1998)

R. W. Robinett

*Energy eigenvalues and periodic orbits for the circular disk or annular infinite well*

Surface Review and Letters **5**, 519 (1998)

H. Primack, U. Smilansky

*On the accuracy of the semiclassical trace formula*

Journal of Physics A **31**, 6253-6277 (1998)

M. G. E. da Luz, E. J. Heller, B. K. Cheng

*Exact form of Green functions for segmented potentials*

Journal of Physics A **31**, 2975-2990 (1998)

K. E. Thylwe

*Higher-order narrow-tube quantizations of quasienergies*

Journal of Physics A **31**, 2253-2267 (1998)

J. S. Hersch, M. R. Haggerty, E. J. Heller

*Influence of diffraction on the spectrum and wave functions of an open system*

Phys. Rev. E **62** 4873-4888 (2000)

R. W. Robinett

*Periodic orbit theory analysis of a family of deformed hemispherical billiard systems*

Surf. Rev. Lett. **7**, 151-160 (2000)

D. Biswas

*Closed almost-periodic orbits in semiclassical quantization of generic polygons*

Phys. Rev. E **61**, 5129-5133 (2000)

E. Bogomolny, N. Pavloff, C. Schmit  
*Diffraction corrections in the trace formula for polygonal billiards*  
Phys. Rev. E **61**, 3689-3711 (2000)

H. Primack, U. Smilansky  
*The quantum three-dimensional Sinai billiard - A semiclassical analysis*  
Phys. Rep. **327**, 1-107 (2000)

M. G. E. da Luz, B. K. Cheng, M. W. Beims  
*Asymptotic Green functions: a generalized semiclassical approach for scattering by multiple barrier potentials*  
J. Phys. A **34**, 5041-5057 (2001)

[Dingle 1973] R.B. Dingle  
*Asymptotic Expansions: their Derivation and Interpretation*  
Academic Press, London (1973)

[Dirac 1935] P. M. Dirac  
*The Principles of Quantum Mechanics*, 2nd ed.  
Oxford, The Clarendon Press (1935)

[Dittrich et al. 1999] T. Dittrich, B. Mehlig, H. Schanz, U. Smilansky, P. Pollner and G. Vattay  
*Spectral correlations in systems undergoing a transition from periodicity to disorder*  
Phys. Rev. E **59**, 6541 (1999)

[Eckhardt 1987] B. Eckhardt  
*Fractal properties of scattering singularities*  
J. Phys. A: Math. Gen. **20**, 5971-5979 (1987)

[Eckhardt 1988] B. Eckhardt  
Phys. Rep. **163**, 205 (1988)



- [Eckhardt, Russberg 1992] B. Eckhardt and G. Russberg  
*Resummations of classical and semi-classical periodic orbit expressions*  
 Phys. Rev. E **47**, 1578 (1993)
- [Efetov 1983] K. B. Efetov  
 Adv. Phys. **32**, 53 (1983).
- [Einstein 1917] A. Einstein  
 Verh. Dtsch. Phys. Ges. **19**, 82 (1917)
- [Erdélyi 1953] A. Erdélyi et al.  
*Higher transcendental functions*  
 McGraw-Hill, NY. (1953)
- [Farajian et al. 1999] A. A. Farajian, K. Esfarjani, Y. Kawazoe  
 Phys. Rev. Lett. **82**, 5084-5087 (1999)
- [Feynman 1948] R. P. Feynman  
 Rev. Mod. Phys. **20**, 367 (1948)
- [Franz 1954] W. Franz  
*Theorie der Beugung Elektromagnetischer Wellen*  
 Springer Verlag, Berlin (1957);  
 Z. Naturforschung **9a**, 705 (1954)
- [Friedrich 1997] H. Friedrich  
*Field induced chaos and chaotic scattering*  
 in Atoms and molecules in intense fields,  
 Structure and Bonding **86**, 97 (1997)
- [Gaspard, Rice 1989] P. Gaspard and S.A. Rice  
 J. Chem. Phys. **90**, 2225 (1989);  
**90**, 2242 (1989);  
**90**, 2255 (1989)
- [Gaspard, Alonso 1993] P. Gaspard, D. Alonso  
 Phys. Rev. **A47**, R3468, (1993)
- [de Gennes 1966] P. G. de Gennes  
*Superconductivity of Metals and Alloys*  
 Benjamin, New York (1966)

- [Graham, Tél 1984] R. Graham and T. Tél  
J. Stat. Phys. **35**, 729 (1984)
- [Graham, Hamm, Tél 1991] R. Graham, A. Hamm and T. Tél  
Phys. Rev. Lett. **66**, 3089 (1991)
- [Graham, Hamm 1992] R. Graham, A. Hamm  
*Non-equilibrium potentials for dynamical systems weakly perturbed by noise*  
in From Phase Transitions to Chaos, ed.: G. Györgyi, I. Kondor, L. Sasvári and T. Tél  
p. 449, World Scientific (1992)
- [Gutzwiller 1967] M. C. Gutzwiller  
J. Math. Phys. **8**, 1979 (1967)
- [Gutzwiller 1969] M. C. Gutzwiller  
J. Math. Phys. **10**, 1004 (1969)
- [Gutzwiller 1970] M. C. Gutzwiller  
J. Math. Phys. **11**, 1791 (1970)
- [Gutzwiller 1971] M. C. Gutzwiller  
J. Math. Phys. **12**, 343 (1971)
- [Gutzwiller 1973] M. C. Gutzwiller  
J. Math. Phys. **14**, 139 (1973)
- [Gutzwiller 1977] M. C. Gutzwiller  
J. Math. Phys. **18**, 806 (1977)
- [Gutzwiller 1990] M. C. Gutzwiller  
*Chaos in Classical and Quantum Mechanics*  
Springer-Verlag, New York (1990)
- [Haake 1991] F. Haake  
*Quantum Signatures of Chaos*  
Springer-Verlag, Berlin (1991)
- [Haken 1978] H. Haken  
*Synergetics: An Introduction*  
Springer-Verlag, Berlin (1978)

- [Hersch, Haggerty, Heller 1999] J. S. Hersch, M. R. Haggerty, and E. J. Heller  
*Diffractive orbits in an open microwave billiard*  
 Phys. Rev. Lett. **83**, 5342 (1999);
- [Ishio, Burgerdörfer 1995] H. Ishio and J. Burgdörfer  
 Phys. Rev. B **51**, 2013 (1995)
- [Jalabert, Baranger, Stone 1990] R. A. Jalabert, H. U. Baranger, and A. D. Stone  
 Phys. Rev. Lett. **65**, 2442 (1990)
- [Jalabert, Baranger, Stone 1993] H. U. Baranger, R. A. Jalabert, A. D. Stone  
 CHAOS **3**, 4 (1993)
- [Jalabert 1999] R. A. Jalabert,  
*The semiclassical tool in mesoscopic physics*  
 in Proceedings of CXLIII Course "New Directions in Quantum Chaos"  
 International School of Physics Varenna Italy (1999)  
 cond-mat/9912038
- [Keller 1958] J. B. Keller  
 Ann. of Phys. New York **4**, 180 (1958)
- [Keller 1958] J. B. Keller  
 in *Calculus of Variations and its Application*  
 American Mathematical Society, p.27 (1958)
- [Keller 1962] J. B. Keller  
 J. Opt. Soc. Amer. **52** 116 (1962)
- [Keller et al. 1994] M. W. Keller, O. Millo, A. Mittal, D. E. Prober and R. N. Sacks  
 Surf. Sci. **305**, 501 (1994)
- [Kudrolli, Sridhar 1997] A. Kudrolli and S. Sridhar  
*Microwave 2-Disk Scattering*  
 in Quantum - Classical Correspondence, eds. D.H.Feng and B.L.Hu,  
 International Press, Cambridge, MA (1997)

- [Lambert, Raimondi 1998] C. J. Lambert and R. Raimondi  
 J. Phys. Condens. Matter **10**, 901 (1998)
- [Lanczos 1949] C. Lanczos  
*The variational principles of Mechanics*  
 University of Toronto Press, p. 253 (1949)
- [Landauer 1957] R. Landauer  
 IBM J. Res. Dev. **1**, 223 (1957);  
 Phys. Mag. **21**, 863 (1970)
- [Lee, Kim 2000] H. W. Lee, C. S. Kim  
*Perfect transmission from mirror reflection symmetry in phase-coherent single-channel systems and its application to monovalent atomic wires*  
 J. Kor. Phys. Soc. **37**, 137 (2000)
- [Lee, Kim 2001] H. W. Lee, C. S. Kim  
 Phys. Rev. B **6307**, 5306 (2001)
- [Likharev 1979] K. K. Likharev  
 Rev. Mod. Phys. **51**, 101 (1979)
- [Lin, Jensen 1996] W. A. Lin and R. V. Jensen  
 Phys. Rev. B **53**, 3638 (1996)
- [Marcus et al. 1992] C. M. Marcus, A. J. Rimberg, R. M. Westervelt, P. F. Hopkins and A. C. Gossard  
 Phys. Rev. Lett. **69**, 506 (1992);  
 C. M. Marcus, R. M. Westervelt, P. F. Hopkins and A. C. Gossard  
 Chaos **3**, 643 (1993)
- [Maslov 1965] V. P. Maslov  
*A perturbációk elmélete és asszimptotikus módszerek (oroszul)*  
 Moszkvai Állami Egyetem (1965)
- [Maslov 1972] V. P. Maslov  
*Théorie des Perturbations et Méthodes Asymptotiques*  
 Dunod, Paris (1972)

- [Maslov, Fjedoriuk 1981] V. P. Maslov and M. V. Fjedoriuk  
*Semiclassical Approximation in Quantum Mechanics*  
 Dordrecht-Reidel (1981)
- [Owen, Monterio, Dando 2000] S. M. Owen, T. S. Monteiro, P. A. Dando  
*Atoms in parallel fields: Analysis with diffractive periodic orbits*  
 Phys. Rev. E **62**, 6388-6397 (2000)
- [Palla, Vattay, Voros 2001] G. Palla, G. Vattay and A. Voros  
*Trace formula for noise corrections to trace formulas*  
 Phys. Rev. E **64**, 012104 (2001)
- [Palla, Vattay, Voros, Sondergaard, Dettmann 2001] G. Palla, G. Vattay, A.  
 Voros, N. Sondergaard, C. P. Dettmann  
*Noise corrections to stochastic trace formulas*  
 Foundations of Physics **31**, 641 (2001)
- [Pauli 1938] W. Pauli  
*On asymptotic series for functions in the theory of diffraction of light*  
 Phys. Rev. **54**, 924 (1938)
- [Pollicot 1986] M. Pollicot  
 Inn. Math **85**, 147 (1986)
- [Pollner, Vattay 1996] P. Pollner and G. Vattay  
*New Method for Computing Topological Pressure*  
 Phys. Rev. Lett. **76**, 4155 (1996)
- [Reichl 1992] L. E. Reichl  
*The Transition to Chaos in Conservative Classical Systems: Quantum  
 Manifestations*  
 Springer-Verlag, New York (1992)
- [Richter 2000] K. Richter  
*Semiclassical Theory of Mesoscopic Quantum Systems*  
 Springer Tracts in Modern Physics **161**  
 Springer-Verlag, Berlin (2000)
- [Riemann et al. 1996] S. M. Riemann, M. Brack, M. Magner, J. Blaschke,  
 M. N. V. Murthy

*Circular quantum billiard with a singular magnetic flux line*  
Phys. Rev. A **53**, 39-48 (1996)

[Roncadelli 1992] M. Roncadelli  
J. Phys. A **25**, L997 (1992);  
M. Roncadelli  
J. Phys. **A26**, L949 (1993)

[Rosenqvist, Vattay, Wirzba 1996] P. E. Rosenqvist, G. Vattay, A. Wirzba  
*Application of the Diffraction Trace Formula to the Three Disk Scattering System*  
J. Stat. Phys. **83**, 243-257 (1996)

[Rosenqvist, Whelan, Wirzba 1996] P. Rosenqvist, N. D. Whelan, A. Wirzba  
J. Phys. **A29**, 5441 (1996)

[Ruelle 1986] D. Ruelle  
J. Stat. Phys. **44**, 281 (1986)

[Rugh 1992] H.H. Rugh  
*The Correlation Spectrum for Hyperbolic Analytic Maps*  
Nonlinearity **5**, 1237 (1992)

[Sakhr, Whelan 2000] J. Sakhr, N. D. Whelan  
*Semiclassical trace formulas for two identical particles*  
Phys. Rev. A **62**, 2109 (2000)

[Schaden, Spuch 1998] Schaden M., Spruch L.,  
*Infinity-free semiclassical evaluation of Casimir effects*  
Phys. Rev. A **58**, 935-953 (1998)

[Schmelcher, Diakonios 1997] P. Schmelcher and F. Diakonios  
Phys. Rev. Lett. **78**, 4733 (1997);  
F. Diakonios, P. Schmelcher and O. Biham (unpublished)

[Schrempp, Schrempp 1980] B. Schrempp, F. Schrempp  
Nucl. Phys. B **163**, 397 (1980)

- [Schulman 1981] L. S. Schulman  
*Techniques and Applications of Path Integration*  
Wiley-Interscience, New York (1981)
- [Schulman 1989] L. S. Schulman  
in *Path Integrals from meV to MeV* ed. V. Sa-yakanit et. al.  
World Scientific, Singapore (1989)
- [Schwieters, Alford, Delos 1996] C. D. Schwieters, J. A. Alford, and J. B. Delos  
*Semiclassical scattering in a circular semiconductor microstructure*  
Phys. Rev. B **54**, 10652 (1996)
- [Shkolovskii et al. 1993] B. I. Shkolovskii, B. Shapiro, B. Sears, P. Lambrianides, H. B. Shore  
Phys. Rev. B **47**, 11487 (1993)
- [Sieber 1999] M. Sieber  
*Geometrical theory of diffraction and spectral statistics*  
J. Phys. A **32**, 7679-7689 (1999)
- [Sieber 2000] M. Sieber  
*Spectral statistics in chaotic systems with a point interaction*  
J. Phys. A **33**, 6263-6278 (2000)
- [Sinai 1968] Y. G. Sinai  
Funct. Anal. Appl. **2** 61 and 245 (1968);  
Russ. Math. Surveys. **25**, 137 (1970)
- [Sirko, Koch, Blumel 1997] Sirko L., Koch P. M., Blumel R.,  
*Experimental Identification of Non-Newtonian Orbits Produced by Ray Splitting in a Dielectric-Loaded Microwave Cavity*  
Phys. Rev. Lett. **78**, 2940-2943 (1997)
- [Smale 1965] S. Smale  
*Diffeomorphisms with Many Periodic Points*  
in S. S. Carnis (ed.) *Differential and Combinatorial Topology*  
Princeton University Press, p. 65 (1965);  
*Differentiable Dynamical Systems*,  
Bull. Am. Math. Soc. **73**, 747 (1967)

- [Smith 1997] H. J. T. Smith  
*Comparison of an erratic super-conducting circuit to chaotic scattering*  
 Canadian Journal of Physics **75**, 485-492 (1997)
- [Sommerfeld 1896] A. Sommerfeld  
 Mathem. Ann. **47**, 317 (1896);  
*Optics*  
 Academic Press, New York (1954)
- [Sondergaard, Palla, Vattay, Voros 2000] N. Sondergaard, G. Palla, G. Vattay, A. Voros  
*Asymptotics of Higher Order Noise Corrections*  
 J. Stat. Phys. **101**, 385-395 (2000)
- [Stöckmann 1999] H. J. Stöckmann  
*Quantum Chaos: An Introduction*  
 Cambridge University Press (1999)
- [Szépfalusy, Tél 1986] P. Szépfalusy and T. Tél  
*New approach to the problem of chaotic repellers*  
 Phys. Rev. A **34**, 2520 (1998)
- [Szépfalusy, Tél, Csordás, Kovács 1987] P. Szépfalusy, T. Tél, A. Csordás and Z. Kovács  
 Phys. Rev. A **36**, 3525 (1987)
- [Tang, Burgerdörfer 1998] J. Tang, L. Wirtz, and J. Burgerdörfer  
 Phys. Rev. B **57**, 9875 (1998).
- [Tél 1987] T. Tél  
*Escape rate from strange sets as an eigenvalue*  
 Phys. Rev. A **36**, 1502 (1987)
- [Van Vleck 1928] J. H. Van Vleck  
 Proc. Natl. Acad. Sci. USA **14**, 178 (1928)
- [Vattay, Wirzba, Rosenqvist 1994] G. Vattay, A. Wirzba and P.E. Rosenqvist  
*Periodic Orbit Theory of Diffraction*  
 Phys. Rev. Lett. **73**, 2304 (1994)



- [Vattay 1994(1)] G. Vattay  
*Differential equations to compute  $\hbar$  corrections of the trace formula*  
 chao-dyn/9406005 (1994)
- [Vattay 1994(2)] G. Vattay  
*An Entire Spectral Determinant for Semiclassical Quantization*  
 Prog. Theor. Phys. Suppl. **116**, 251 (1994)
- [Vattay, Wirzba, Rosenqvist 1995] G. Vattay, A. Wirzba and P. E. Rosenqvist  
*Inclusion of Diffraction Effects in the Gutzwiller Trace Formula*  
 in Dynamical Systems and Chaos **2** p. 463, World Scientific (1995)
- [Vattay, Rosenqvist 1996] G. Vattay and P.E. Rosenqvist  
*Periodic Orbit Quantization beyond Semiclassical Approximation*  
 Phys. Rev. Lett. **76**, 335 (1996)
- [Vattay 1996] G. Vattay  
*Bohr-Sommerfeld quantization of periodic orbits*  
 Phys. Rev. Lett. **76** 1059–1062 (1996)
- [Vattay et al. 1997] G. Vattay, J. Cserti, G. Palla and G. Szálka  
*Diffraction in the Semiclassical Description of Mesoscopic Devices*  
 Chaos Solitons and Fractals **8**, 1031 (1997)
- [Voros 1988] A. Voros  
 J. Phys. A **21**, 685 (1988)
- [Voros 1994] A. Voros  
 Prog. Theor. Phys. Suppl. **116**,17 (1994)
- [Walker, Monterio 2000] P. N. Walker, T. S. Monteiro  
*Spectral properties of atoms in fields: A semiclassical analysis*  
 Phys. Rev. E **61**, 6444 (2000)
- [Whelan 1995] N. D. Whelan  
 Phys. Rev. E **51**, 3778 (1995)
- [Wintgen 1988] D. Wintgen  
 Phys. Rev. Lett. **61**, 1803 (1988)

- [Wirtz et al. 1997] L. Wirtz, J. Tang, and J. Burgdörfer  
Phys. Rev. B **56**, 7589 (1997)
- [Wirtz et al. 1999] L. Wirtz, J. Z. Tang, J. Burgdorfer  
*Gauge-invariant theory for semiclassical magnetotransport through ballistic microstructures*  
Phys. Rev. B **59** 2956-2967 (1999)
- [Wirzba 1992] A. Wirzba  
CHAOS **2**, 77 (1992);  
Nucl. Phys. **A560**, 136 (1993)
- [Wirzba] A. Wirzba, private communication.
- [Zharekeshev, Kramer 1997] I. Zharekeshev and B. Kramer  
Phys. Rev. Lett. **79**, 717 (1997)  
és a benne található referenciák
- [Zinn-Justin 1989] J. Zinn-Justin  
*Quantum Field Theory and Critical Phenomena*  
Oxford University Press (1989)