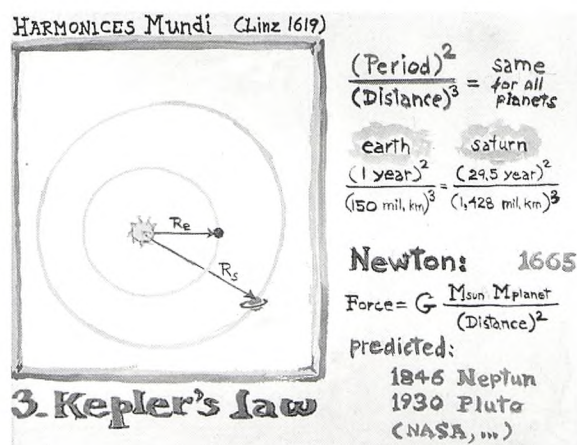


Kvantekaos

Predrag Cvitanović
Center for Chaos og Turbulens Studier
Niels Bohr Institutet

Efter mange års tvivl, om hvorvidt der overhovedet findes kaos i kvantemekanik, kan der i dag måles utvetydige spor af kaos i selve det første og det bedst kendte eksempel på anvendelse af kvantemekanikken, brintatomet.

Et "klassisk" brintatom kan visualiseres som et planetsystem, hvori elektronen farer rundt om kernen i en Kepler ellipse. Kepler formulerede sin første og anden lov i 1609. Keplers første lov postulerer at planeter følger elliptiske baner. Indtil da beskrev man den tilsyneladende meget komplicerede planetbevægelse ved hjælp af epicykler. En epicykel er den kurve et punkt på et hjul beskriver når hjulet ruller langs periferien af en anden cirkel. Ved epicykler bygger man den iagttagne ikke-cirkulære planet bane af en følge af cykler lagt ovenpå hinanden. Selve planeten cirkulerer langs den sidste og mindste cirkel, som så cirkulerer ovenpå den næste, osv..



Figur 1. Keplers 3. lov.

Selvom man idag taler nedladende om epicykler, er de faktisk den eneste praktiske metode for præcisionsberegninger af de fleste fysiske problemstillinger. Idag hedder epicykler "perturbationsteori", og Keplers bidrag var at erstatte starttilnærmelsen, oldtidens cirkler, med en meget bedre tilnærmelse, ellipsen. Keplers anden lov beskriver hastigheden af en planet. Planeten bevæger sig hurtigst i nærheden af solen og langsomt når den befinder sig langt væk. Hastigheden ændrer sig således at en linie mellem planeten og solen overstryger lige store arealer i lige store tidsrum.

Keplers tredje lov fra 1619 relaterer planetens omløbstid til planetens afstand fra solen, og postulerer

at kvadratet på planetens omløbstid er proportional med afstanden fra solen i tredje potens. I vores århundrede inspirerede denne lov til Bohrs kvantisering af brintatomet.

Keplers tredje lov var resultatet af 20 års hårde gennemberegninger af Tycho Brahes måledata, og var Keplers store personlige triumf. Og det er da også en følelse af afsluttet hovedværk der lyser os imøde i hans forord til *Harmonices Mundi* fra 1619:

Keplers eufori².

"Det som jeg forudandede for 22 år siden, så snart jeg opdagede de fem legemer mellem de himmelske baner - hvad jeg troede fast på lang tid før jeg havde set Ptolomeus' *Harmonices*; det som jeg havde lovet mine venner i titlen på denne bog, som jeg havde navngivet før end jeg var sikker på min opdagelse; hvad jeg for 16 år siden opfordrede til at blive søgt efter; det for hvilket jeg samarbejdede med Tycho Brahe, for hvilket jeg bosatte mig i Prag; for hvilket jeg har brugt mine bedste år til astronomiske overvejelser - det har jeg endelig klarlagt, og jeg har indset dets sandhed udover min mest optimistiske forventninger. Det er ikke atten måneder siden at jeg så det første glimt af lys, tre måneder før solopgang, ganske få dage før den klare sol, der er så beundringsværdig at se på, skinnede på mig. Intet holder mig tilbage; jeg vil hengive mig til mit hellige raseri; jeg vil triumfere over menneskeheden ved den ærlige indrømmelse at jeg har stjålet Ægyptens gyldne vaser til at bygge et tempel for min Gud langt væk fra Ægypten. Hvis I tilgiver mig, vil jeg juble; hvis I er vrede, kan jeg bære det; terningen er kastet, bogen er skrevet, klar til at blive læst nu eller af eftertiden - jeg bekymrer mig ikke om hvilket; den kan godt vente et århundrede på en læser, som Gud har ventet 6000 år på en iagttager."

Denne indsigt styrkede ham i hans mystiske tro på, at verden er bygget på underliggende harmonier. Keplers tredje lov førte til Newtons skabelse af naturvidenskab i moderne forstand. I pestårene 1664-1666 flygtede den unge Newton fra Cambridge til landet, og formulerede der tyngdeloven: Tiltrækningskraften mellem to legemer er proportional med produktet af deres masser, divideret med kvadratet på deres indbyrdes afstand.

Herefter fulgte den klassiske fysiks triumftogt. I 1846 regnede man sig til, at der skulle findes en ukendt planet i en bestemt bane hvis små afvigelser i de andre planeters

baner skulle kunne forklares. Og så blev Neptun opdaget. I 1930 fulgte opdagelsen af Pluto, og i dag følger satelliter og rumsonder Newtons love. Suset fra denne succes førte til hovmod hos fagets mestre - allerede I begyndelsen af 17-hundredetallet skrev baron Gottfried Wilhelm Leibniz i "Von dem Verhängnisse":

Leibniz determinisme:

"At alt er frembragt gennem en forudbestemt skæbne, det er næsten så sikkert som tre gange tre er ni. (...) Hvis, for eksempel, en kugle møder en anden kugle i det fri rum og hvis deres størrelser og baner og retninger er kendt før sammenstødet, så kan vi forudse og beregne hvordan de vil støde fra hinanden og hvilken vej de vil tage efter deres møde. Der følges ganske simple love som også vil være gyldige uanset hvor mange kugler der er, og uanset om legemerne har en anden form end kugler. Heraf ses at alt foregår matematisk - dvs. ufejlbarligt - i hele den vide verden, så hvis nogen havde en tilstrækkelig indsigt i tingenes indre væsen, og også havde erindring og intelligens nok til at redegøre for og bruge alle omstændigheder, så ville han være en profet og ville se fremtiden i nutiden som i et spejl."

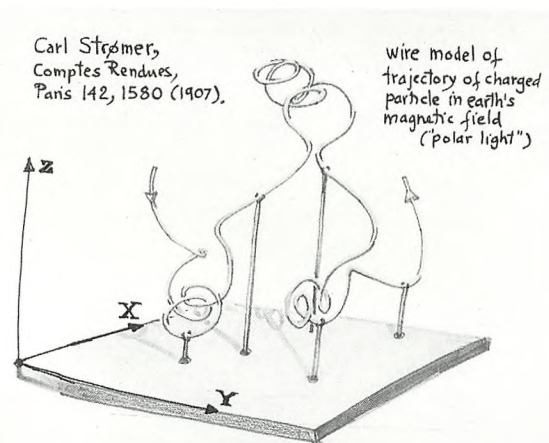
Eller kort sagt: Hvis der bare fandtes et væsen med tilstrækkelig intelligens og tålmodighed, ville det kunne beregne universets udvikling vilkårligt langt frem i tiden.

Alligevel er den meget smukke Kepler ellipse, som ledte til Newtons klassiske dynamik og som styrkede troen på at orden hersker i vores univers, ikke reglen, men undtagelsen. Så snart man tilføjer et tredje legeme til systemet, udviser den klassiske dynamik en fantastisk rig struktur. Her gælder Keplers love ikke længere. En planet snor sig langs en uendelig kompliceret, kaotisk bane, årstider varierer uden nogensinde at gentage sig præcist, og langtidsforudsigelser af kalenderen kan være lige så risikable som vejrprognoser på vores planet. Sandheden er, at vi ikke engang ved om vores tilsyneladende så forudsigelige solsystem er stabilt. Vi ved idag fra computersimulationer, at alle planeter endnu vil være med os om 5 milliarder år. Men samtidig tyder disse simulationer på, at solsystemet er svagt kaotisk, og der kan komme et skønne dag hvor en af planeterne forlader os.

Dette problem har optaget matematikere siden Newtons tid, og i 1885 udlovede Sveriges kong Oscar II en guldmedalje til den som stringent kunne bevise, at vores solsystem vil bestå til evig tid. Henri Poincaré gjorde sig fortjent til guldmedaljen, men han beviste det modsatte: Et typisk dynamisk system er kaotisk, snarere end "keplersk". Det betyder at man kan finde et system hvor planeter kører tilsyneladende regelmæssigt rundt i 1001 år, for så i år 1002 pludselig at slynge en af planeterne ud for evigt. Og ikke nok med det. Hvis man flytter en af planeterne bare en ångström, kan katastrofen ske måske

om 600 år, eller måske om en milliard år.

Poincarés matematik var abstrakt. Han forsøgte ikke engang at skitsere sine kaotiske trajektorier, og der var stort set ingen fysiker som fulgte med. For eksempel brugte den norske fysiker Carl Størmer der levede i begyndelsen af vort århundrede, det meste af sit liv og håndkraft til at beregne banerne for ladede partikler i jordens magnetiske felt. Han håbede dermed at kunne udvikle en teori for nordlys. Disse opslidende regnestykker var antagelig verdens første beregninger af kaotiske baner. For at kunne visualisere sine resultater, byggede han 3-dimensionale ståltråds modeller af trajektorierne.



Figur 2. En af Carl Størmers tredimensionelle visualiseringer af en elektrons bane. Fremstillet i ståltråd.

Idag forventes det af enhver ph.d. studerende i fysik at kunne beregne 100.000 gange længere trajektorier i løbet af få dage og at kunne vise, at Størmers trajektorier var kaotiske.

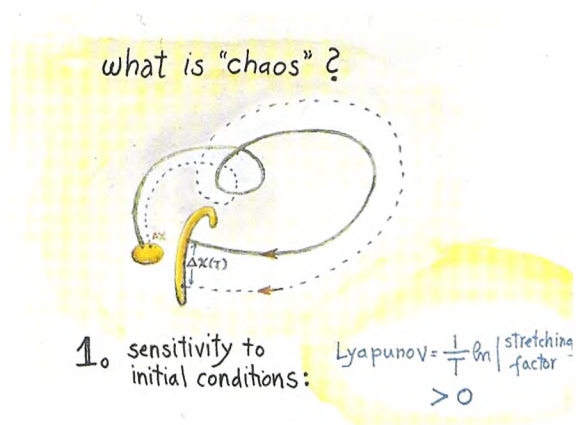
Hvad er kaos?

I dag har ordet "kaos" en præcis betydning for fysikere. For at et dynamisk system skal være kaotisk, skal to betingelser være opfyldt.

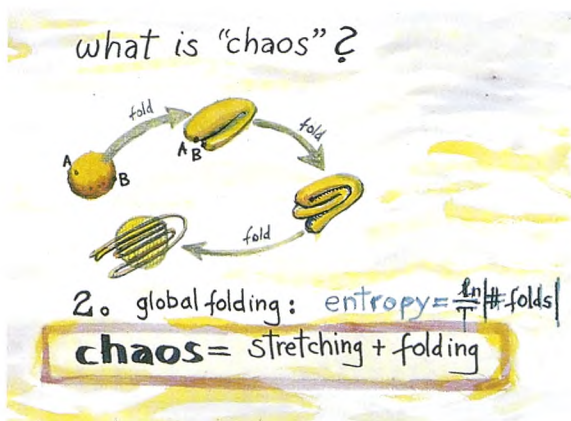
- For det første, skal systemet udvise følsomhed overfor valg af begyndelsespunkt. Afstanden mellem to nærliggende startpunkter skal vokse eksponentielt med tiden, eller, som det hedder i faget: Systemet skal have "positiv Lyapunov eksponent". Det betyder at en lille fejl i begyndelsen fører til en stor fejl efter et stykke tid.
- Den anden betingelse er at, to fjerne startpunkters trajektorier vil komme vilkårligt nær til hinanden vilkårligt mange gange.

Man kan tænke på denne proces som æltning af wienerbrød. Hvis systemet er lokalt ustabil, men globalt begrænset, må der nødvendigvis forgå en foldningsproces. Dette er der ikke noget usædvanligt i.

Hver gang vi blander lidt mælk i kaffen, gennemfører vi dette eksperiment. Hvis antallet af folder vokser eksponentielt med tiden siger fagfolk at systemet udviser "positiv Kolmogorov-entropi". Et sådant system som er lokalt ustabil og globalt foldende betegnes som "kaotisk". Kaotiske systemer finder man nutildags alle vegne. Alle klassiske dynamiske systemer vil (med få idealiserede undtagelser, som keplerske ellipse bevægelser og den harmoniske oscillator) udvise en vis grad af kaos. Selvom de klassiske naturlove er enkle og deterministiske, er langtidforudsigelse umulig.



Figur 3. Hvad er kaos? I. Nære tilstande glider fra hinanden.



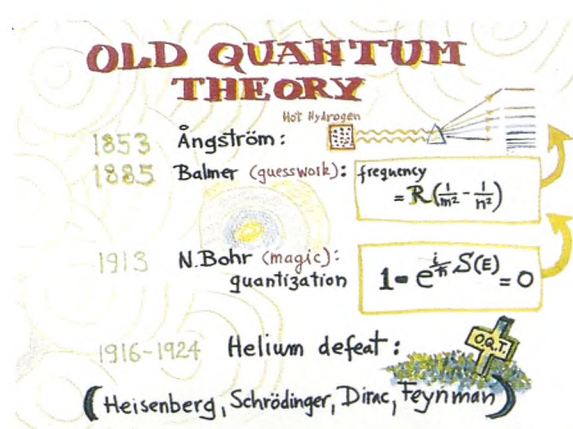
Figur 4. Hvad er kaos? II. Omegnen bliver blandet op med partikler fra nær og fjern.

Og heri ligger "kaos" berigelse af vores begrebsmæssige rækkevidde. Skridtet fra Keplers platoniske harmonier til Newtons ligninger gav os et sprog som gav mening til mange hidtil usammenhængende facts og førte os til en helt anden verdensopfattelse. På samme måde har de seneste årtiers udvikling af "kaos" sproget gjort det

muligt for os at begribe komplekse fænomener som før simpelthen var ubeskrivelige.

Men hvad med kvantemekanik?

Vi ved at verden følger kvantemekanikkens love! De klassiske er bare bekvemme tilnærmelser. Atomerne, molekylerne er beskrevet af kvantemekanik. Udviser de også kaos? Man er instinktivt skeptisk når man stilles over for kombination af to sexede begreber som "kaos" og "kvantum". "Kvantekaos" har i længere tid været et kontroversielt begreb, og eksistensen af selve fænomenet har været betvivlet. Man har endog bevist, at kvantekaos ikke eksisterer, dvs. at kvantemekanik ikke udviser "positiv Kolmogorov-entropi" og ikke har "positive Lyapunov-eksponenter". Man har heller ikke kunnet finde andre diagnostiske indicier for eksistensen af deterministisk kaos. De mere fundamentalistisk mindedde fysikere går så vidt som til at kræve, at selve ordet "kvantekaos" ikke må nævnes i fagligt kvalificeret selskab. Problemet er bare det, at vi siden Poincarés tid har vidst, at stort set alle dynamiske systemer udviser kaos. Vi kan ikke lade være med at spekulere på hvad det indebærer for atomar fysik.

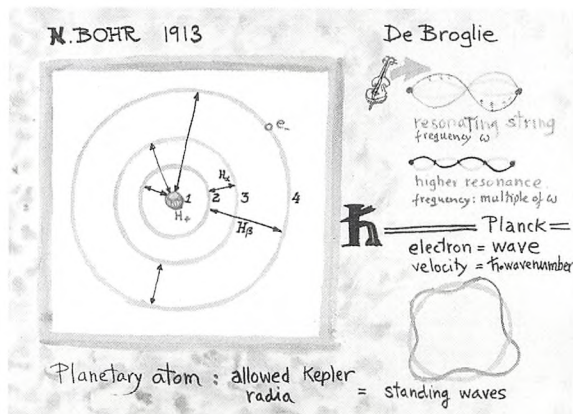


Figur 5. Hovedårstal i den tidlige kvantemekaniks historie.

For at kunne diskutere dette spørgsmål er vi nødt til at vide noget om kvantemekanik. Heldigvis behøver vi ikke at vide mere end man vidste i 1913.

I 1853 opdagede Ångström at spektret af det lys som varm brint udsender ikke er et kontinuum men består af skarpe frekvenser, og i 1885 lykkedes det Balmer at finde et enkelt numerisk forhold mellem brintliniernes frekvenser. I 1913 benyttede Niels Bohr keplerske baner til at kvantisere brintatomet: ideén var at brintatomet er et atomart planetsystem, hvor elektronen kører i keplerske baner, men ikke alle baner er tilladte. De Broglie tolkede elektron som en bølge, og de tilladte keplerske baner som præcis disse for hvilken i følge af tredje Keplers lov elektronen var en stående bølge. En stående bølge kender alle musikelskere - det er den bevægelse en streng udviser når den

svinger i sin grundtone, ellers når man anslår den i en flageolet, en højere harmonisk resonans. De Broglie-Bohr's stående bølger får man ved at bøje strengen og lukke den i en cirkel, så den svinger som en cirkelfjeder man slipper.



Figur 6. Bohr-de Broglie bølger.

Den slags argumenter er ret så uoverbevisende, og man ville ikke have taget Bohr alvorligt hvis ikke hans planetære model viste sig at have en stor forudsigelseskraft. Bohr kunne udlede balmerformlen, og forudsige spektret af ioniseret helium. Efter disse indledende succeser var det næste skridt klart: Efter at man havde beskrevet en-elektron atomerne, skulle man tage fat i to-elektron atomerne, dvs. atomart helium. Det forsøgte Bohr og Kramers fra 1916 til 1924, og det blev til en pinlig fiasko, en fiasko der bidrog til gamle kvanteteoris død. Som vi snart får at se var rygtene om kvanteteoris død dog noget overdrevne.

Idag ved vi at deres forsøg mislykkedes fordi de forsøgte at bruge keplerske baner til beskrivelsen af Poincarés tre-legeme system - og det kan bare ikke lade sig gøre. Poincarés matematik var svært gennemskuelig. Så da Niels Bohr benyttede keplerske baner til at kvantisere brintatomet, var der kun én blandt samtidens kritiske røster, som var opmærksom på, at fundamentet under Bohr-Sommerfeld modellen smuldrer såfremt Poincarés kaos har noget på sig. Denne kritiske røst var verdens mest berømte fysiker, Albert Einstein, og tidskriftet et af tidens mest ansete, og alligevel blev Einsteins 1917-artikel først citeret 41 år senere.

Årsagen var, at Bohrs model hurtigt blev afløst af Heisenberg og Schrödingers kvantemekanik. Og dermed blev Bohrs noget suspekte brug af keplerske baner erstattet af eksakt, omend svært forståelig teori. Selvom teorien er svært at forstå, ledte den direkte til opfindelsen af transistoren og laseren.

Og dog må en ærlig fysiker erkende at man end ikke kan få heliums spektrum ud af denne eksakte ligning.

Kvanter & kaos

Den indsigt som grundlagde kvantekaos kom til Martin Gutzwiller i 1970, men det har taget næsten 20 år at udvikle det til et værktøj. Gutzwiller arbejder på IBM. Han var interesseret i bevægelsen af en elektron i en halvleders krystalgitter, dvs. hvordan man laver en bedre transistor. Sådan et gitter er anisotropisk - elektronen følger én kraft langs krystalens symmetriplan, og en anden på tværs, og følger typisk en "anisotrop" Kepler bane - en bane som aldrig lukker på sig selv, men vandrer kaotisk rundt. Gutzwiller indså derpå at dette system indeholder uendelig mange periodiske baner, der har det tilfælles at de alle er højst ustabile. Denne indsigt som kan spores tilbage til Poincaré, som skrev i slutningen af sidste århundrede:

Poincaré⁴:

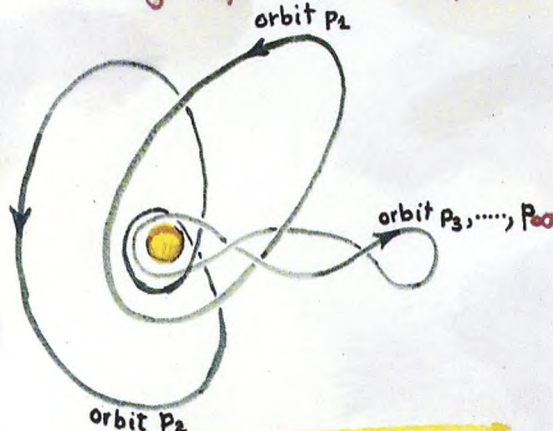
"Étant données des équations ... et une solution particulière quelconque de ces équations, on peut toujours trouver une solution périodique (dont la période peut, il est vrai, être très longue), telle que la différence entre les deux solutions soit aussi petite qu'on le veut, pendant un temps aussi long qu'on le veut. D'ailleurs, ce qui nous rend ces solutions périodiques si précieuses, c'est qu'elles sont, pour ainsi dire, la seule brèche par où nous puissions essayer de pénétrer dans une place jusqu'ici réputée inabordable."

"Givet ligningerne ... og hvilken som helst speciel løsning af disse ligninger, kan man altid finde en periodisk løsning (selvom der er sandt at perioden kan være meget lang) sådan, at forskellen mellem de to løsninger vil være vilkårlig lille, i vilkårlig lang tid. Det, som gør disse periodiske løsninger så kostelige er, at de er de eneste håb vi har om at kunne bryde igennem til dette sted, som indtil nu betragtedes som utilgængeligt."

Poincaré fulgte ikke ideén op, men Gutzwiller postulerede at alle disse baner skal indgå i kvantiserings betingelsen, men hver med sin vægt. I en vis forstand er den sidste tids flirt mellem "kaos" og "kvantum" en direkte fortsættelse af Bohrs idé fra 1913. I dag ved vi, at kaotiske systemer indeholder et robust "skelet", som netop består af alle de periodiske baner, og at selv stærkt kaotiske systemer skal beskrives ved hjælp af disse baner. Mere konkret, den oprindelige Bohr-Sommerfeld kvantisering fra 1913 antager, at elektronen opfører sig som en bølge, og at kun de keplerske ellipser som svarer til stationære bølger er tilladte stationære atomare tilstande. I Bohr-Sommerfeld kvantiseringens *moderne*, kaotiske generalisering fortolkes elektronen som en stationær bølge der ikklæder "skeletet" af alle periodiske baner. I klassiske lærebøger ses elektronorbitaler afbildet som en sandsynlighedssky uden om en klassisk bane. I Gutzwillers beskrivelse er den samme sky mængden af alle baner,

QUANTUM + CHAOS

= infinity of unstable periodic orbits



action $S_p(\text{energy}) = \int d\vec{q} \cdot \vec{p}$

counts wavenumber of a trajectory; if integer, standing wave

Bohr 1916:

$$(1 - e^{\frac{i}{\hbar} S(E)}) = 0$$

Gutzwiller 1971

$$\prod_p \left(1 - \frac{e^{\frac{i}{\hbar} S_p(E)}}{\sqrt{\text{stability of } p}}\right) = 0$$

∞ of unstable periodic orbits

Figur 7. Gutzwiller kvantisering: Funktionen $S_p(E)$ kaldes for virkningsfunktionen hørende til bane p . Venstre side af Bohr's kvantiseringsbetingelse er altid numerisk mindre end 1 og bliver 0 for de baner hvor S_p er et multiplum af $\hbar \cdot 2\pi$ svarende til stående Bohr-De Broglie-bølger. Gutzwiller tildeler en stabilitet til hver bane således at de mindre stabile baner bidrager mindre til produktet.

hver vægtet med en sandsynlighed efter hvor stabil den er. I Gutzwiller formelen optæller funktionen S_p antallet af elektron-bølgelængder langs en periodisk bane. p , og kvadratroden af stabilitetsfaktoren siger, at mere ustabile trajektorier bidrager mindre. Meget lange trajektorier er meget ustabile, og det gør det muligt at beregne spektret ved hjælp af et moderat antal af de korteste periodiske baner.

I praksis kræver implementeringen af denne smukke og enkle idé en vis matematisk virtuositet, fordi der findes uendelig mange periodiske baner, og det er ikke umiddelbart klart, hvordan de kan håndteres. Meget hurtigt viser det sig, at problemet er tæt forbundet med nogle af matematikkens dunkleste gåder. Ideén slumrede i matematisk limbo i årtier og det er kun indenfor de sidste få år at arbejderne indenfor kaotiske systemer har udviklet analytiske og numeriske værktøjer med en slagkraft, der kan konkurrere med de traditionelle metoder for de næsten-keplerske systemer. Det bidrog vi også til her i København, blandt andet ved at studere det for os mest nærliggende eksempel på deterministisk kaos: flipper maskiner - beskrevet i denne nummer af KVANT i Per Rosenqvists artikel.

At en flipper maskine er deterministisk og kaotisk er indlysende - men det viser sig at når man engang for alle

har lært hvordan de uendelig mange periodiske trajektorier kan håndteres, kan man tage fat i atomare systemer.

1991 D. WINTGEN



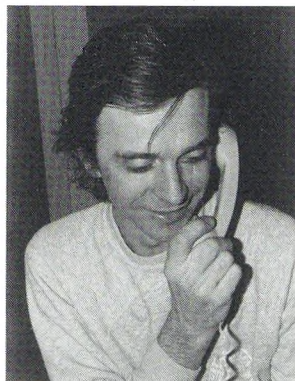
Figur 8. I 1991 lykkedes det Dieter Wintgen at reproducere heliums spektrum ud fra ustabile elektronbaner.

Forbløffende nok er det mest overbevisende ved den nye teori, at den kan anvendes på den gamle kvante-

mekaniks oprindelige triumf: brintatomet - og den gamle kvantemekaniks oprindelige dødstød: heliumatomet. I dag kan man ved hjælp af de klassiske periodiske baner beregne brintatomets kvantespektra og ligeledes måle dem eksperimentelt. Det er endog lykkedes at se de ustabile periodiske baner i et brintatom udsat for et kraftigt magnetfelt. Det mest imponerende fremskridt hidtil blev gjort af unge tyske fysiker Dieter Wintgen. Det lykkedes ham at fremtrylle helium-spektret ud af periodiske baner, og, viser det sig, med meget mindre besvær end når man løser Schrödinger ligningen numerisk. Men når man husker at det er præcis det samme helium spektrum som man opgav at forstå i 20'rne, så må vi drage konklusionen: Kvantekaos findes.

I 1913 var både "kvantum" og "kaos" tilstede. Det der manglede var vores visualiserings redskab, computeren. For mig personligt er det mest fascinerende ved "kvantekaos" at forsøge på at gætte mig til hvordan kvantemekanikken ville have udviklet sig, hvis enhver fysiker i

1913 kunne have beskuet kaotiske baner som vi kan idag, og dermed haft mulighed for intuitivt at begribe Poincarés bud. Udviklingen kunne har ført til en helt anden teori, måske endda en meget mere gennemskuelig kvanteteori end den vi har idag.



Predrag Cvitanović er Carlsbergfonds professor ved NBI. Forskningsområde: ulineær dynamik.

Referencer:

- 1) I. Peterson, *Newton's Clock: Chaos in the Solar System*, (W.H Freeman, New York 1993).
- 2) J. Kepler, *Harmonices Mundi*, (Linz, 1619); oversat af Helge Kragh.
- 3) A. Pais, *Inward Bound*, (Oxford University Press 1986).
- 4) H. Poincaré, *Les méthodes nouvelles de la mécanique céleste*, (Guthier-Villars, Paris 1892-99).
- 5) M. Born, *The Mechanics of the Atom*, (F. Ungar Publishing Co., New York 1927).
- 6) M.C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, (Springer, New York 1990).
- 7) D. Wintgen, K. Richter and G. Tanner, "The semi-classical helium atom", *CHAOS* 2, 19 (1992).