

第七章 粒子在位置空间中的运动 I

上一章内容的补充说明

在上一章中我们讨论了从有限维复空间到连续 Hilbert 空间的过渡, 并且, 以一种不甚严格的方式, 将有限维空间中完备性的表示形式推广到连续情形, 即

$$\text{有限维情形} \quad \sum_{i=1}^n |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| = \mathbb{1} \quad (1)$$

$$\text{连续情形} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dq |q\rangle\langle q| = \mathbb{1} \text{ (identity)} \quad (2)$$

这里, $|\alpha_i\rangle$ 是某个力学量 A 的本征向量, $|q\rangle$ 是位置算子 Q 的本征向量.

需要指出的是, (2) 式在数学上是严格的. 在 F. Riesz, B. Sz.-Nagy, Functional Analysis (Dover Publications, Inc. 1990) 一书的 120 节有详细证明. 该节的名称是 Spectral decomposition of a self-adjoint transformation.

所谓的“谱” (spectrum), 简单地说, 就是算子的本征值. 我们关心的是厄密算子, 所以本征值是实数. 当 \mathbb{C}^n 中的厄密算子 A 被表示为

$$A = \sum_{i=1}^n a_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$$

我们称之为本征分解形式, 实际上就是数学中说的谱分解 (Spectral decomposition).

如果厄密算子的谱是连续的, 比如位置算子 X , 它的本征值 $x \in (-\infty, +\infty)$, 那么问题是, X 能否表示为

$$X = \int_{-\infty}^{+\infty} x |x\rangle\langle x| dx$$

泛函分析给出了肯定的回答.

推广到三维空间中, 位置算子 \mathbf{R} 是向量算子, $\mathbf{R} = (X, Y, Z)$, 本征值 $\mathbf{R} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$, 相应的本征向量 $|\mathbf{r}\rangle = |x, y, z\rangle$, 完备性被表示为

$$\int d^3r |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dz |x, y, z\rangle\langle x, y, z| = \mathbb{1}$$

另外, Ballentine 书的第 3 章讨论了时空变换的生成元与物理量的联系, 这部分内容有助于理解物理理论的基本框架.

位置空间

位置空间 \mathbb{R}^3

描述现象的空间. 通过测量, 得到粒子在经典的现实空间 (\mathbb{R}^3) 中的几率分布.

Hilbert 空间

描述粒子的波函数的空间. 量子态在位置表象中的表示.

对于一个一般意义上的量子态 $|\Psi\rangle$, 从 $t = 0$ 时刻的 $|\Psi(0)\rangle$ 到 t 时刻的演化由 Schrödinger 方程决定,

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = H |\Psi(t)\rangle$$

如今, 我们关心的是粒子在位置空间 \mathbb{R}^3 中的几率分布, 因此需要在位置表象中考虑 $|\Psi(t)\rangle$ 的表示形式,

$$|\Psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle x, y, z | \Psi(t) \rangle |x, y, z\rangle$$

简写为

$$|\Psi(t)\rangle = \int d^3r \Psi(\mathbf{r}, t) |\mathbf{r}\rangle, \quad \Psi(\mathbf{r}, t) = \langle x, y, z | \Psi(t) \rangle$$

接着考虑系统的哈密顿量 H . 回顾在经典力学中得到哈密顿量的过程, 在一定的条件下, 哈密顿量 H 才能等于系统的能量 E ¹. 这里, 我们讨论 $H = E$ 的情形. 需要注意的是, 虽然在这种情形下哈密顿量可以表示为动能和势能的和, 但是, 在动能的表达式中, 需要注意正则动量和机械动量的区别. 正则动量 (或者广义动量, 共轭动量) 和广义坐标的 Poisson 括号是 $\{q, p\} = 1$. 正则动量可以不等于机械动量, 典型的例子是电磁场中的带电粒子, 质量 m 带电量 q 的粒子的机械动量是 $m\mathbf{v}$, 它和正则动量 \mathbf{p} 之间的关系是 $m\mathbf{v} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}$, 其中 \mathbf{A} 是电磁场的矢量势. 在这种情况下, 带电粒子的动能是

$$T = \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2}{2m}$$

在量子力学中, 出现在对易子 $[X, P_x] = i\hbar$ 中的动量是正则动量而不是机械动量, 在位置表象中的形式是 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$.

目前我们讨论正则动量等于机械动量的情形. 在位置表象中, 动量 \mathbf{P} 被表示为

$$\mathbf{P} \longrightarrow -i\hbar \nabla.$$

或者

$$P_x \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad P_y \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad P_z \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}.$$

动能算子被表示为

$$T = \frac{P^2}{2m} \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

其中 $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

在位置表象中, 位置算子 \mathbf{R} 的形式很简单,

$$\mathbf{R} = (X, Y, Z) \longrightarrow \mathbf{r} = (x, y, z)$$

因而势能算子 $V(\mathbf{r}, t)$ 被表示为简单的函数形式 $V(\mathbf{r}, t)$.

¹ Herbert Goldstein, Charles Poole, and John Safko, Classical Mechanics (3rd ed.), (Addison-Wesley) 第 8 章.

于是 Schrödinger 方程在位置表象中的形式是

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t).$$

当势能 $V(\mathbf{r}, t)$ 不显含时间的时候, $V(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r})$, 可以进行变量分离. 令

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})T(t).$$

变量分离后, 可以得到这样形式的方程

$$\text{空间部分的方程} = \text{时间部分的方程} = E.$$

这里 E 是常数.

容易解出时间部分的方程,

$$T(t) = e^{-iEt/\hbar}.$$

空间部分的方程实际上就是粒子的 Hamilton 量的本征方程,

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (3)$$

在位置表象中, 方程 (3) 是关于空间位置坐标的二阶偏微分方程. 同时还要注意的, 能量本征值 E 是未知的, 也是要求解的.

假设我们求出了 $\psi(\mathbf{r})$, 那么就可以写出 $\Psi(\mathbf{r}, t)$,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar} \quad (4)$$

通过求解 (3) 式得到的 $\psi(\mathbf{r})$ 只是 H 的本征函数, 而 (4) 式也只是一个定态, 它不足以反映量子系统从某个初态开始的随时间演化的过程 —— 除非系统的初态是哈密顿量的某个本征态.

如果系统的初态 $|\Psi(t)\rangle$ 不是哈密顿量的本征态, 那么应该在哈密顿量的本征态上展开. 假设哈密顿量不含时, 且能级是离散的, 记作 E_n , 相应的本征态为 $|\varphi_n\rangle$, 那么有

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0) |\varphi_n\rangle$$

在 t 时刻, 系统的量子态是

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\Psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0) e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle$$

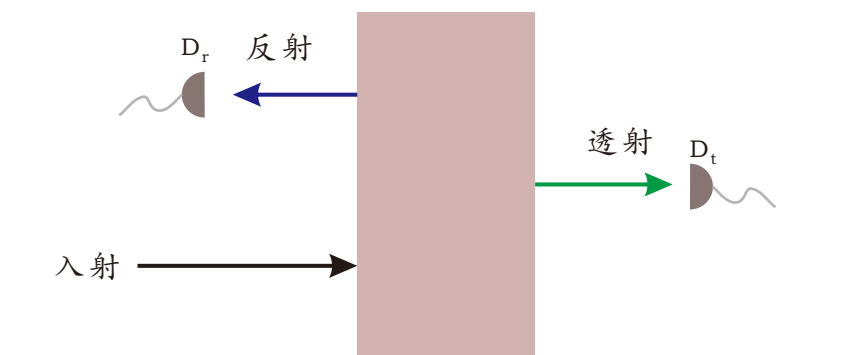
在位置表象中,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n(0) e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(\mathbf{r}, t)$$

其中 $\varphi_n(\mathbf{r})$ 是本征态 $|\varphi_n\rangle$ 在位置表象中的波函数, 即 $\varphi_n(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \varphi_n \rangle$.

Schrödinger 方程的形式很像波动方程, 而且, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 也被称为波函数, 所以, 很容易有这样的看法: $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 就像是在三维空间中传播的波, 或者说, 用波场描述一个粒子, 或者说, 粒子就像是一个波包. 但是, 这样的一些看法是不恰当的. 我们看一个例子.

设想一维空间中的势能 $V(x)$ 是一个势垒. 一束粒子从左侧入射 (如下图所示). 有反射束和透射束, 分别用两个探测器 D_r 和 D_t 检测反射粒子和透射粒子.



假设粒子的反射几率和透射几率都是 $1/2$, 即 $p_r = p_t = \frac{1}{2}$, 那么, 两个探测器同时有响应的几率是多少?

先讨论一维谐振子, 目的是为第六章的内容提供一个具体的例证.

一维谐振子

谐振子是一个非常重要的模型, 表现在固体物理、对环境的模拟、量子光学和量子场论等多个领域中. 下面叙述解决谐振子问题的两种途径, 它们分别来自 Lie 代数方法和求解数理方程.

一维谐振子的哈密顿量是

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$$

我们要求解 H 的本征值和本征态.

计算如下对易子

$$[X^2, P^2] = 2i\hbar(XP + PX), \quad [X^2, XP + PX] = 4i\hbar X^2, \quad [P^2, XP + PX] = -4i\hbar P^2$$

表明三个厄密算子 X^2 , P^2 和 $XP + PX$ 构成封闭的代数结构. 谐振子哈密顿量的这个特性是代数解法的基础.

为了是运算过程更为简洁, 作无量纲化处理, 令

$$X' = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} X, \quad P' = \left(\frac{1}{\hbar m\omega}\right)^{1/2} P$$

哈密顿量重新写为

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega(X'^2 + P'^2)$$

并且 $[X', P'] = i\mathbb{1}$. 以下省略撇号, 讨论如下形式的哈密顿量

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega(X^2 + P^2), \quad [X, P] = i\mathbb{1}$$

定义如下两个算子

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iP) \quad (5)$$

二者的对易子

$$[a, a^\dagger] = \mathbb{1} \quad (6)$$

哈密顿量表示为

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega (a a^\dagger + a^\dagger a) = \hbar \omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

令

$$N = a^\dagger a$$

N 是厄密算子, 而且

$$H \text{ 的本征值} = \hbar \omega \left(N \text{ 的本征值} + \frac{1}{2} \right)$$

于是关注算子 N .

$$[N, a] = -a, \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger \quad (7)$$

设 N 的本征值是 n , 相应的的本征态记作 $|n\rangle$, 即

$$N |n\rangle = n |n\rangle$$

利用对易关系 (7), 有

$$N(a |n\rangle) = (aN - a) |n\rangle = a(N - \mathbb{1}) |n\rangle = (n - 1)(a |n\rangle)$$

这表明 $a |n\rangle$ 是 N 的本征态 (未归一), 相应的本征值是 $n - 1$. 算子 a 对 N 的本征态的作用效果是, 使其对应的本征值减少 1. 所以我们称 a 为**降算子**.

类似地,

$$N(a^\dagger |n\rangle) = (a^\dagger N + a^\dagger) |n\rangle = a^\dagger (N + \mathbb{1}) |n\rangle = (n + 1)(a^\dagger |n\rangle)$$

a^\dagger 对 N 的本征态的作用效果是, 使其对应的本征值增大 1, 故称之为**升算子**.

现在来证明 N 的本征值 n 是非负整数. 首先, 由于 $N = a^\dagger a$ 是半正定的, 所以它的本征值满足 $n \geq 0$. 再注意到 $a |n\rangle$ 对应的本征值是 $n - 1$.

用 $|n - 1\rangle$ 表示与本征值 $n - 1$ 对应的本征态. $a |n\rangle$ 与 $|n - 1\rangle$ 只是相差一个归一化常数, 即

$$a |n\rangle \propto |n - 1\rangle$$

考虑 a^k 作用于 $|n\rangle$, 得到的 $a^k |n\rangle$, 它正比于 $|n - k\rangle$, 而且, $a^k |n\rangle$ 对应的本征值应该是 $n - k$. 而我们又知道, N 的本征值只能是非负的, $n - k \geq 0$, 所以 k 应该有一个上限, 使得 $n - k$ 非负. k 的上限与开始的时候给定的 n 有关, 设为 K_n , 这意谓着

$$n - K_n \geq 0, \quad n - K_n - 1 < 0$$

这同时也意谓着

$$a |n - K_n\rangle = 0$$

这是因为, 如果 $a |n - K_n\rangle$ 不等于零向量, 那么就只能正比于 $|n - K_n - 1\rangle$, 但是与 $|n - K_n - 1\rangle$ 对应的本征值是负的, 这违反了 N 的正定性. 于是, a 作为降算子, 不能使 $|n - K_n\rangle$ 降到本征值更低的本征态. 接下去就有, 一方面 $N |n - K_n\rangle = (n - K_n) |n - K_n\rangle$, 另一方面

$$N |n - K_n\rangle = a^\dagger a |n - K_n\rangle = 0$$

所以

$$n = K_n$$

K_n 是非负的整数, 所以 N 的本征值 n 是非负整数, $n = 0, 1, 2, \dots$, 没有上限.

$$N |n\rangle = n |n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$H |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle$$

H 或 N 的本征态 $|n\rangle$ 构成了一组无穷多个可列的基向量. H 或 N 在这组基上可以表示为无穷维的对角矩阵, 这个表象就是谐振子的能量表象. 在第五章中提到过关于 Hilbert 空间的一个定理: L_2 空间存在一组无穷多个可列基向量. 谐振子的能量表象就是一个典型的例子.

升降算子作用于 H 的本征态的效果是

$$a |n\rangle \propto |n-1\rangle, \quad a^\dagger |n\rangle \propto |n+1\rangle$$

将 $a |n\rangle$ 和 $a^\dagger |n\rangle$ 归一化.

$$\langle n | a^\dagger a | n \rangle = n, \quad \langle n | a a^\dagger | n \rangle = n + 1$$

所以

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

H 的最小本征值是 $\frac{1}{2}\hbar\omega$, 对应于 $n = 0$, 相应的本征态 $|0\rangle$ 是谐振子的基态. 用升算子作用于 $|0\rangle$, 得到

$$|n\rangle = (n!)^{-1/2} (a^\dagger)^n |0\rangle$$

这样就得到了谐振子哈密顿量的所有本征态.

基态 $|0\rangle$ 满足方程

$$a |0\rangle = 0,$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(X' + iP') = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} X + i \left(\frac{1}{\hbar m\omega} \right)^{1/2} P \right]$$

令 $\beta = \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2}$. 在位置表象中, $|0\rangle$ 表示为波函数 $\psi_0(x)$, 满足如下方程

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\beta x + \frac{1}{\beta} \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0$$

容易解出

$$\psi_0(x) \propto e^{-\frac{1}{2}\beta^2 x^2}$$

确定了归一化常数之后, 有

$$\psi_0(x) = \frac{\beta^{1/2}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}\beta^2 x^2}$$

稍后我们将看到, $\psi_0(x)$ 是满足最小不确定关系的量子态的波函数.

处于基态的谐振子的能量并不等于零, 这是量子现象. 谐振子的能级是

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

相邻能级之间的间距是相等的, 均为 $\hbar\omega$.

可以写出 a 和 a^\dagger 的矩阵元,

$$\langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1}, \quad \langle n'|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}$$

进而可以将 a 和 a^\dagger 表示为无穷维的矩阵.

$$a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

a 的矩阵形式是上面无穷维矩阵的转置.

用 a 和 a^\dagger 表示 X 和 P , 于是, 在能量表象中, 位置算子和动量算子也就具有了矩阵形式, 当然它们都是无限维的.

力学量在 H 的本征态上的期望值. 用升降算子表示位置 X 和 P , 有

$$\langle X \rangle = \langle P \rangle = 0$$

$$\langle X^2 \rangle = \langle n|X^2|n\rangle$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|(a + a^\dagger)(a + a^\dagger)|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a|n\rangle \\ &= \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{m\omega} \end{aligned}$$

$$\text{同理有 } \langle n|P^2|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar m\omega$$

于是 X 的方差与 P 的方差的乘积是

$$(\Delta X)^2(\Delta P)^2 = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2$$

或者

$$\Delta X \Delta P = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar$$

当 $n = 0$, 即对于谐振子的基态, 不确定关系达到最小值 $\frac{\hbar}{2}$.

小结:

- 谐振子的哈密顿量的本征向量构成无限多个可列的基向量.
- 谐振子处于基态 $|0\rangle$ 时, 能量并不为零, 而是具有零点能 $\frac{1}{2}\hbar\omega$. 而经典谐振子的最低能量是零.
- 谐振子的相邻能级的能量差是固定的, $\hbar\omega$.
- 能级有下限但没有上限.

- 如果希望进一步了解能量本征态在位置表象中的波函数形式, 那么可以在位置表象中求解方程 $a|0\rangle = 0$ 得到基态波函数, 然后使用升算子 a^\dagger 得到任意的 $|n\rangle$ 在位置表象中的波函数.

谐振子的本征函数

求解空间部分的 Schrödinger 方程, 哈密顿量的本征方程是

$$H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$$

这里暂且不知道能量本征值 E 是否为分立的, 但是能够确定 $E \geq 0$, 因为谐振子的哈密顿量是正定的.

在位置表象中,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = E\varphi(x).$$

进行无量纲化, 令

$$q = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x, \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (8)$$

把波函数 $\varphi(x)$ 改写为 $u(q)$,

$$\frac{d^2u(q)}{dq^2} + (\lambda - q^2)u(q) = 0.$$

分析 $|q|$ 很大的时候 $u(q)$ 的渐近行为².

$$|q| \rightarrow \infty, \quad \frac{d^2u}{dq^2} - q^2u = 0, \quad (9)$$

u 的渐近解的形式是 $u \sim e^{\pm\frac{1}{2}q^2}$. 解释如下.

先考虑 $e^{-\frac{1}{2}q^2}$, 对 q 的二阶导数是

$$\frac{d^2e^{-\frac{1}{2}q^2}}{dq^2} = (q^2 - 1)e^{-\frac{1}{2}q^2}$$

可以把这个结果直接代入方程 (9), 得到

$$(q^2 - 1)e^{-\frac{1}{2}q^2} - q^2e^{-\frac{1}{2}q^2} = -e^{-\frac{1}{2}q^2} \xrightarrow{|q| \rightarrow \infty} 0$$

也可以认为, 在 $(q^2 - 1)e^{-\frac{1}{2}q^2}$ 中, 当 q^2 很大的时候, $q^2 - 1 \simeq q^2$, 所以

$$(q^2 - 1)e^{-\frac{1}{2}q^2} - q^2e^{-\frac{1}{2}q^2} \simeq q^2e^{-\frac{1}{2}q^2} - q^2e^{-\frac{1}{2}q^2} = 0$$

这说明 $e^{-\frac{1}{2}q^2}$ 满足渐近方程 (9).

再来看 $e^{+\frac{1}{2}q^2}$, 对 q 的二阶导数是

$$\frac{d^2e^{+\frac{1}{2}q^2}}{dq^2} = (q^2 + 1)e^{+\frac{1}{2}q^2} \simeq q^2e^{+\frac{1}{2}q^2}$$

容易看出, 它同样满足渐近方程 (9).

再考虑对波函数的要求: 在无穷远出应该趋于零, 所以舍去 $e^{+\frac{1}{2}q^2}$.

我们只能选择 $u \sim e^{-\frac{1}{2}q^2}$. 设

$$u(q) = H(q)e^{-\frac{1}{2}q^2}.$$

²不可能有真实的 x 可以很大的谐振子, 这里只是数学上的分析.

其中 $H(q)$ 是 q 的多项式, 满足方程,

$$\frac{d^2 H}{dq^2} - 2q \frac{dH}{dq} + (\lambda - 1)H = 0.$$

将 $H(q)$ 展开为

$$H(q) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n q^n.$$

可以得到如下递推关系,

$$a_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+2)(n+1)} a_n, \quad (n \geq 0). \quad (10)$$

如果对 n 求和不断, 不在有限项上终止, 那么有

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} \rightarrow \frac{2}{n}.$$

这种渐近行为如同函数 $q^k e^{q^2}$ 的渐近行为, 这里 $k > 0$. 这将导致

$$H(q) e^{-\frac{1}{2}q^2} \xrightarrow{q \rightarrow \infty} e^{\frac{1}{2}q^2}.$$

这是不能接受的发散的结果. 所以, $H(q)$ 只能是有限项的多项式.

设 $H(q)$ 的项数是 $n+1$, 即, 第 $n+2$ 项为零, 那么有

$$a_{n+2} = 0 \implies \lambda = 2n+1, \quad n \geq 0.$$

这时, $H(q)$ 是一个 n 阶多项式. 由 (8) 式, 有

$$E = E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (11)$$

这就是谐振子的能量本征值. 相应的本征函数是

$$\varphi_n(x) = \left[\frac{\beta}{\pi^{1/2} 2^n n!} \right]^{1/2} H_n(\beta x) e^{-\frac{1}{2}\beta^2 x^2}, \quad (12)$$

其中 $\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$. $H_n(z)$ 是 Hermite 多项式,

$$\exp(-s^2 + 2sz) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(z)}{n!} s^n.$$

至于 Hermite 函数的性质, 查看数学手册或有关数理方程的教科书.

- 波函数 $\varphi_n(x)$ 是以前在 Lie 代数解法中得到的 $|n\rangle$ 在位置表象中的表示, 它们构成无穷维 Hilbert 空间的一组基.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^*(x) \varphi_n(x) dx = \delta_{mn}.$$

- 在 Lie 代数解法中, 考虑降算子的下限得到了能级的分立. 在这里叙述的数理方法中, 级数的中止给出了能级的分立.
- 对于不同的 n , 作图 $|\varphi_n(x)|^2$. 分析经典谐振子出现在某个位置上的几率密度, 考察在 n 很大的时候量子几率分布与经典几率分布之间的对应.

谐振子的基态, 最小不确定关系

谐振子的基态 $|0\rangle$ 满足位置-动量不确定的下限 $\frac{\hbar}{2}$, 即

$$\Delta X \Delta P = \frac{\hbar}{2}$$

这里的 ΔX 和 ΔP 分别是位置算子和动量算子在基态上的标准方差.

现在, 我们从一般的角度出发推导不确定关系, 然后考虑位置-动量不确定关系, 并寻找满足其下限的量子态.

设 A 和 B 是某个量子系统的力学量, $|\psi\rangle$ 是描述该系统的量子态.

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle, \quad \langle B \rangle = \langle \psi | B | \psi \rangle$$

$$\langle A^2 \rangle = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle, \quad \langle B^2 \rangle = \langle \psi | B^2 | \psi \rangle$$

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle, \quad (\Delta B)^2 = \langle \psi | (B - \langle B \rangle)^2 | \psi \rangle$$

令

$$|\varphi_1\rangle = (A - \langle A \rangle) |\psi\rangle, \quad |\varphi_2\rangle = (B - \langle B \rangle) |\psi\rangle$$

二者均未归一.

$$(\Delta A)^2 = \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle, \quad (\Delta B)^2 = \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle$$

由 Schwarz 不等式, 有

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 = \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle \geq |\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle|^2 \quad (13)$$

再令

$$\mathcal{A} = A - \langle A \rangle \mathbb{1}, \quad \mathcal{B} = B - \langle B \rangle \mathbb{1}$$

\mathcal{A} 和 \mathcal{B} 的相乘可以写为

$$\mathcal{A}\mathcal{B} = \frac{1}{2}\{\mathcal{A}, \mathcal{B}\} + \frac{1}{2}[\mathcal{A}, \mathcal{B}] \quad (14)$$

其中 $\{\mathcal{A}, \mathcal{B}\} = \mathcal{A}\mathcal{B} + \mathcal{B}\mathcal{A}$ 是反对易子, 是厄密的. 而 $[\mathcal{A}, \mathcal{B}] = \mathcal{A}\mathcal{B} - \mathcal{B}\mathcal{A}$ 是对易子, 是反厄密的.

容易看到如下关系

$$\begin{array}{ccc} (\Delta A)^2 (\Delta B)^2 & \geq & |\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle|^2 \\ \parallel & & \parallel \\ \langle \mathcal{A}^2 \rangle \langle \mathcal{B}^2 \rangle & & |\langle \mathcal{A}\mathcal{B} \rangle|^2 \end{array}$$

所以有

$$\langle \mathcal{A}^2 \rangle \langle \mathcal{B}^2 \rangle \geq |\langle \mathcal{A}\mathcal{B} \rangle|^2$$

利用 (14), 并注意到 $\{\mathcal{A}, \mathcal{B}\}$ 的期望值是实数, 而 $[\mathcal{A}, \mathcal{B}]$ 的期望值是纯虚数.

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A}^2 \rangle \langle \mathcal{B}^2 \rangle &\geq |\langle \mathcal{A}\mathcal{B} \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4} |\langle \{\mathcal{A}, \mathcal{B}\} \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle [\mathcal{A}, \mathcal{B}] \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4} \underbrace{|\langle \{\mathcal{A} - \langle A \rangle, \mathcal{B} - \langle B \rangle\} \rangle|^2}_{\text{下一步略去此项}} + \frac{1}{4} |\langle [\mathcal{A} - \langle A \rangle, \mathcal{B} - \langle B \rangle] \rangle|^2 \end{aligned} \quad (15)$$

$$\geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2 \quad (16)$$

综合以上过程, 有

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2 \quad (17)$$

或者

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| \quad (18)$$

这就是关于两个力学量 A 和 B 的不确定关系. (18) 式的推导过程表明, 不确定关系来自于量子力学的基本假设——力学量被表示为 Hilbert 空间中的算子. 而算子的相乘是不能随意交换位置的, 于是就有了对易关系, 由此导致了不确定关系. (18) 式描述的不确定关系不涉及测量过程中的误差和扰动.

现在回到位置-动量不确定关系. 令 $A = X$, $B = P$, 有

$$\Delta X \Delta P \geq \frac{\hbar}{2} \quad (19)$$

考虑上式的下限, 问这样的问题: 什么形式的量子态可以使 (19) 式取等号?

注意到不确定关系的推导过程中有两个地方出现了不等号. 一处是 (13), 另一处是从 (15) 到 (16). 因此, 为了使 (19) 取等号, 下面两个条件 (20) 和 (21) 须同时成立.

(13) 取等号 $\iff |\varphi_1\rangle \propto |\varphi_2\rangle$, 即

$$(P - \langle P \rangle) |\psi\rangle = \lambda (X - \langle X \rangle) |\psi\rangle, \quad \lambda \in \mathbb{C} \quad (20)$$

(15) = (16) \iff 反对易子的期望值为零, 即

$$\langle \psi | \{X - \langle X | X \rangle, P - \langle P | P \rangle\} | \psi \rangle = 0 \quad (21)$$

现在的任务就是根据 (20) 和 (21) 求出 $|\psi\rangle$. 将这两个条件结合在一起, 得到

$$\langle \psi | \lambda (X - \langle X | X \rangle)^2 | \psi \rangle + \langle \psi | \lambda^* (X - \langle X | X \rangle)^2 | \psi \rangle = 0$$

即

$$(\lambda + \lambda^*) (\Delta X)^2 = 0$$

这里 ΔX 不能为零.

这是因为, 如果 $\Delta X = 0$, 那么有

$$(P - \langle P \rangle) |\psi\rangle = (X - \langle X \rangle) |\psi\rangle = 0$$

这个方程只能给出 $|\psi\rangle = 0$.

于是 $\lambda + \lambda^* = 0$, 即 λ 是纯虚数, 令 $\lambda = i\gamma$, 且 $\gamma > 0$.

再次利用 (20) 和 (21), 有

$$\underbrace{\langle \psi | (P - \langle P | P \rangle)^2 | \psi \rangle}_{(\Delta P)^2} = \gamma^2 \underbrace{\langle \psi | (X - \langle X | X \rangle)^2 | \psi \rangle}_{(\Delta X)^2}$$

可以将 γ 表示为

$$\gamma = \frac{\Delta P}{\Delta X} = \frac{1}{2} \frac{1}{(\Delta X)^2} = 2(\Delta P)^2$$

其中用到了最小不确定关系 $\Delta X \Delta P = \frac{1}{2}$, 并且将 \hbar 设为 1.

现在可以确定 $|\psi\rangle$ 的波函数形式. 在位置表象中, (20) 式表示为

$$\left(-i \frac{d}{dx} - \langle P \rangle\right) \psi(x) = i\gamma(x - \langle X \rangle) \psi(x)$$

解出

$$\psi(x) = C \exp\{i \langle P \rangle (x - \langle X \rangle)\} \exp\left\{-\frac{\gamma}{2}(x - \langle X \rangle)^2\right\}$$

利用归一化条件确定常数 C .

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 \\ &= |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\gamma(x - \langle X \rangle)^2} \\ &= |C|^2 \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} = |C|^2 \sqrt{2\pi} (\Delta X) \end{aligned}$$

将 C 设为正实数, $C = (2\pi)^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{\Delta X}}$.

$$\psi(x) = (2\pi)^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{\Delta X}} e^{i \langle P \rangle (x - \langle X \rangle)} e^{-\frac{(x - \langle X \rangle)^2}{4(\Delta X)^2}}$$

可以将 ψ 选择为对称的形式, 令 $\langle X \rangle = \langle P \rangle = 0$, $\Delta X = \Delta P = \frac{1}{\sqrt{2}}$, 有

$$\psi(x) = \pi^{-1/4} e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

这实际上就是谐振子的基态波函数.

与谐振子有关的其它形式的哈密顿量

1. 势能包含 X 的一次项,

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \lambda X$$

这相当于平衡位置平移了的谐振子, 能级有平移, 但间距不变, 波函数也有平移.

2. 哈密顿量中有 xp 项, 比如

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega(X^2 + P^2) + \lambda(XP + PX)$$

可以通过正则变换解除 X 和 P 的耦合.

3. 两维谐振子,

$$H = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_1^2 X^2 + \frac{1}{2}m\omega_2^2 Y^2$$

令

$$H_x = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_1^2 X^2, \quad H_y = \frac{P_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_2^2 Y^2$$

显然有 $[H_x, H_y] = 0$. 哈密顿量 H 的本征态可以表示为

$$|\varphi\rangle = |\varphi_x\rangle \otimes |\varphi_y\rangle$$

其中 $|\varphi_x\rangle$ 和 $|\varphi_y\rangle$ 分别是 H_x 和 H_y 的本征态. 本征值是

$$E_{n_x, n_y} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1 + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2, \quad n_x, n_y = 0, 1, \dots$$

当 $\omega_1 = \omega_2$ 时, 哈密顿量 H 的能级存在简并 (基态仍然是非简并的). 在这种情况下, 可以定义角动量算子 $L = XP_y - YP_x$, 容易验证, $[L, H] = 0$, 角动量 L 是守恒量.

4. x 方向上的谐振子在 y 方向上自由运动. 哈密顿量是

$$H = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad (22)$$

令

$$H_x = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2, \quad H_y = \frac{P_y^2}{2m}$$

仍然有 $[H_x, H_y] = 0$, 哈密顿量 H 的本征态仍然可以表示为 $|\varphi\rangle = |\varphi_x\rangle \otimes |\varphi_y\rangle$, 其中 $|\varphi_x\rangle$ 仍然是谐振子的本征态, 但是 $|\varphi_y\rangle$ 则是自由运动粒子的能量本征态, 相应的本征值是连续的,

$$H_y |\varphi_y\rangle = E_y |\varphi_y\rangle, \quad E_y = \frac{p_y^2}{2m}$$

其中 p_y 是 y 方向上的动量 P_y 的本征值, $P_y |\varphi_y\rangle = p_y |\varphi_y\rangle$. 可以看到, $|\varphi_y\rangle$ 是 P_y 和 H_y 的共同本征态, 于是将 $|\varphi_y\rangle$ 记作 $|p_y\rangle$. 应该注意到, 能级 E_y 是简并的, $|\pm p_y\rangle$ 都对应于系统的能级 E_y .

哈密顿量 (22) 的本征值表示为

$$E_{n, p_y} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{p_y^2}{2m}$$

它包含两部分, 一是离散的, 一是连续的.

分束器 (Beam Splitter)

在讨论谐振子的代数解法的时候, 引入过降算子 a 和升算子 a^\dagger . 在量子场论中, 它们有另外的名字, 湮灭算子和产生算子. 简单地说, 让升算子作用于真空态 $|0\rangle$, 得到一个单粒子态, 记作 $|1\rangle$,

$$a^\dagger |0\rangle = |1\rangle$$

用降算子作用于 $|1\rangle$, 回到真空态,

$$a |1\rangle = |0\rangle$$

借此机会, 讨论一下量子光学实验中常用的分束器.

经典情形, 光被视作电磁波. 入射波的复振幅为 E_1 , 反射波和透射波的复振幅分别是 E_2 和 E_3 . 设分束器是理想的, 没有损耗. 反射率和透射率分别是 r 和 t , 它们可以是复数.

$$E_2 = rE_1, \quad E_3 = tE_1$$

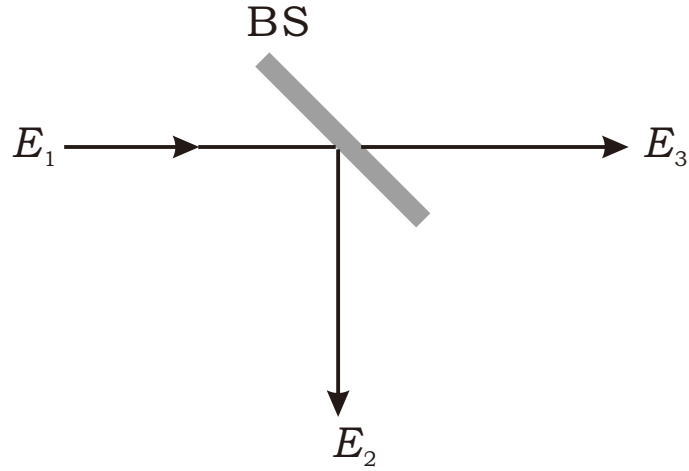


图 1

对于 50 : 50 分束器, $|r| = |t| = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

入射波的强度应该等于反射波的强度和透射波的强度之和,

$$|E_1|^2 = |E_2|^2 + |E_3|^2$$

也就是说

$$|r|^2 + |t|^2 = 1$$

在量子情形中, 需要将复振幅 E_i 代之以湮灭算子 a_i , $i = 1, 2, 3$. 如果与经典情形类比, 应该有

$$a_2 = ra_1, \quad a_3 = ta_1 \quad (23)$$

由于分束器既不会产生光子, 也不会湮灭光子, 所以上式中的 r 和 t 仍然应该满足

$$|r|^2 + |t|^2 = 1 \quad (24)$$

而我们又知道, 场算子满足对易关系

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0$$

但是, 从 (23), 有

$$[a_2, a_2^\dagger] = |r|^2 [a_1, a_1^\dagger] = |r|^2$$

$$[a_3, a_3^\dagger] = |t|^2 [a_1, a_1^\dagger] = |t|^2$$

$$[a_2, a_3^\dagger] = rt^* \neq 0$$

这表明, (23) 式所示的变换不能正确描述量子情形下分束器. 原因在于, 在分束器的入射端有一个没有使用的端口, 在经典情形下, 这个未使用的端口不会影响出射端. 但是, 在量子情形中, 这个未使用的端口包含一个处于真空态的量子化的场, 这将影响分束器的出射端. 下图中的 a_0 表示入射端的另一个端口上的湮灭算子. 相应的反射率和透射率分别是 r' 和 t' .

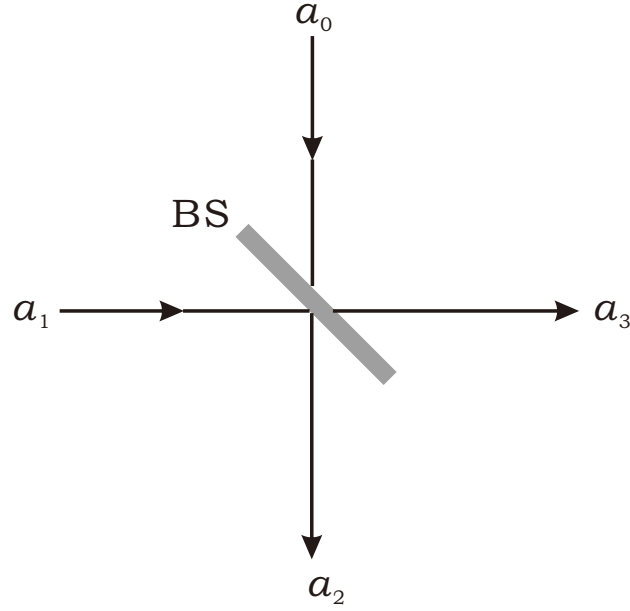


图 2

入射端和出射端之间的联系是

$$a_2 = ra_1 + t'a_0, \quad a_3 = ta_1 + r'a_0 \quad (25)$$

或者用矩阵表示

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t' & r \\ r' & t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} \quad (26)$$

根据基本对易关系以及 (24), 有

$$|r| = |r'|, \quad |t| = |t'|, \quad |r|^2 + |t|^2 = 1, \quad r^*t' + r't^* = 0, \quad r^*t + r't'^* = 0$$

表明 (26) 中的矩阵是酉的.

反射束与透射束之间的相位差取决于分束器的构造. 对于 50 : 50 分束器, 设反射与透射之间有 $\pi/2$ 的相位差, 那么

$$a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_0 + ia_1), \quad a_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(ia_0 + a_1) \quad (27)$$

注意到 (26) 并不能反映算子的变换, 可以将算子的变换写为如下形式

$$a_2 = U^\dagger a_0 U, \quad a_3 = U^\dagger a_1 U \quad (28)$$

其中

$$U = \exp \left[i \frac{\pi}{4} (a_0^\dagger a_1 + a_0 a_1^\dagger) \right]$$

变换 (28) 可以看作在 Heisenberg 图像中对分束器的描述.

另一方面, 可以在 Schrödinger 图像中考虑量子态经过了分束器中的的变化. 光子数态 n 来自产生算子对真空态的 n 次作用. 如果入射端的两个端口上没有光子, 即 $|0\rangle_0 |0\rangle_1$ (这里, ket 符号里的数字表示光子数, 下标表示端

口), 那么在出射端必然没有光子出射, 即 $|0\rangle_2 |0\rangle_3$, 即

$$|0\rangle_0 |0\rangle_1 \xrightarrow{\text{BS}} |0\rangle_2 |0\rangle_3$$

如果在端口 1 上有一个入射光子, 那么入射端的量子态是 $a_1^\dagger |0\rangle_0 |0\rangle_1$. 从 (27) 可以得到算子 a_1 在出射端的表现形式

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-ia_2 + a_3)$$

于是, 从入射端到出射端的变换是

$$|0\rangle_0 |1\rangle_1 = a_1^\dagger |0\rangle_0 |0\rangle_1 \xrightarrow{\text{BS}} \frac{1}{\sqrt{2}}(ia_2^\dagger + a_3^\dagger) |0\rangle_2 |0\rangle_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(i |1\rangle_2 |0\rangle_3 + |0\rangle_2 |1\rangle_3) \quad (29)$$

这个结果表明, 当入射态是 $|0\rangle_0 |1\rangle_1$ (或者 $|1\rangle_0 |0\rangle_1$), 即只有一个光子, 那么或者反射, 或者透射, 几率均为 1/2, 不会同时观测到反射光子和透射光子, 即不会有符合计数 (coincident count).

接着考虑入射端有两个光子, 一个从端口 0 入射, 另一个从端口 1 入射, 则入射态是

$$|1\rangle_0 |1\rangle_1 = a_0^\dagger a_1^\dagger |0\rangle_0 |0\rangle_1$$

再注意到

$$a_0^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_2^\dagger + ia_3^\dagger), \quad a_1^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(ia_2^\dagger + a_3^\dagger)$$

于是有

$$\begin{aligned} |1\rangle_0 |1\rangle_1 &\xrightarrow{\text{BS}} \frac{1}{2}(a_2^\dagger + ia_3^\dagger)(ia_2^\dagger + a_3^\dagger) |0\rangle_2 |0\rangle_3 \\ &= \frac{i}{2}(a_2^\dagger a_2^\dagger + a_3^\dagger a_3^\dagger) |0\rangle_2 |0\rangle_3 \\ &= \frac{i}{\sqrt{2}}(|2\rangle_2 |0\rangle_3 + |0\rangle_2 |2\rangle_3) \end{aligned} \quad (30)$$

在上面的第一个等式中, 会出现 $a_2^\dagger a_3^\dagger - a_3^\dagger a_2^\dagger$, 相应的态是 $|1\rangle_2 |1\rangle_3 - |1\rangle_3 |1\rangle_2$. 由于全同粒子不可区分, 并且玻色子交换对称, 所以有 $|1\rangle_2 |1\rangle_3 = |1\rangle_3 |1\rangle_2$. 在出射端, 仍然不会出现符合计数. 但是, 这不同于入射端只有一个光子的情形. 在某种意义上, 式 (29) 描述的结果可以用粒子性解释. 而 (30) 的结果则是波动性的体现. 出射态 $|1\rangle_2 |1\rangle_3$ 有两个来源: 一个是两个入射的光子都反射, 另一个是两个入射光子都透射. 而反射光子和透射光子之间有 $\frac{\pi}{2}$ 的相位差, 所以这两个来源叠加的结果是彼此相消, 结果为零.

另外还需注意到, 只有在入射态为 $|1\rangle_0 |1\rangle_1$ 的时候, 出射态才会出现两个光子集中分布在一个端口的情况. 如果在端口 0 和 1 上分别有 n ($n > 1$) 个光子入射, 即 $|n\rangle_0 |n\rangle_1$, 那么出射态不是 $|2n\rangle_2 |0\rangle_3 + e^{i\phi} |0\rangle_2 |2n\rangle_3$.