

第七章 粒子在位置空间中的运动 VI

传播子 (Propagator)

传播子是时间演化算子在位置表象中的表示

量子态随时间的演化是由系统的哈密顿量决定的, 演化形式是一个酉变换,

$$|\psi(0)\rangle \longrightarrow |\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle \quad (1)$$

回顾有限维空间中的情形. 选择特定的表象, 比如 A 表象, $A = \sum_j a_j |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|$. 在 A 表象中, 可以写出 (1) 式的分量形式,

$$\langle\alpha_j|\psi(t)\rangle = \langle\alpha_j|U(t)|\psi(0)\rangle = \sum_k \langle\alpha_j|U(t)|\alpha_k\rangle \langle\alpha_k|\psi(0)\rangle \quad (2)$$

再把 $|\psi(0)\rangle$ 和 $|\psi(t)\rangle$ 在 A 表象中展开,

$$|\psi(0)\rangle = \sum_i c_i(0) |\alpha_i\rangle, \quad |\psi(t)\rangle = \sum_i c_i(t) |\alpha_i\rangle$$

则 (2) 式可以写为

$$c_j(t) = \sum_k u_{jk}(t) c_k(0) \quad (3)$$

其中 $u_{jk}(t) = \langle\alpha_j|U(t)|\alpha_k\rangle$ 是 $U(t)$ 在 A 表象中的矩阵元. 上式不过就是计算量子态在特定的基向量上的展开系数随时间的变化, 是在 Schrödinger 绘景中描述量子态的时间演化过程.

考察 (3) 式, 可以说, 在 $t = 0$ 时刻所有基向量上的几率幅都对 t 时刻在某个基向量 (比如 $|\alpha_j\rangle$) 上的几率幅有贡献. 换句话说, $c_j(t)$ 并不是由孤单一个的 $c_j(0)$ 发展而来的, 而是由所有的 $c_k(0)$ ($k = 1, 2, \dots, n$) 共同演化而得到的结果.

现在, 把上面的叙述放置到位置表象中. 位置表象的基向量是连续分布的 $|\mathbf{r}\rangle = |x, y, z\rangle$. 考虑量子态的时间演化,

$$|\psi(t_2)\rangle = U(t_2, t_1) |\psi(t_1)\rangle \quad (4)$$

这里作了无关紧要的参数调整, 相对于把初始时刻设为 t_1 .

我们希望了解 t_2 时刻在 \mathbf{r}_2 位置的几率幅, 这就需要用左矢 $\langle\mathbf{r}_2|$ 对 (4) 式两端作内积.

$$\begin{aligned} \langle\mathbf{r}_2|\psi(t_2)\rangle &= \langle\mathbf{r}_2|U(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle \\ &= \int d^3r_1 \langle\mathbf{r}_2|U(t_2, t_1)|\mathbf{r}_1\rangle \langle\mathbf{r}_1|\psi(t_1)\rangle \end{aligned} \quad (6)$$

用波函数表示,

$$\psi(\mathbf{r}_2, t_2) = \int d^3r_1 \langle\mathbf{r}_2|U(t_2, t_1)|\mathbf{r}_1\rangle \psi(\mathbf{r}_1, t_1) \quad (7)$$

与前面有限维空间中的形式相比,无非是将求和换做积分而已.

不过,由于空间位置参量的介入,在理解上有了进一步的意义. (7) 式的左端是 t_2 时刻在空间某个特定的某个位置 \mathbf{r}_2 处的几率幅,或者简单地说,在时空点 (t_2, \mathbf{r}_2) 上的几率幅. 右端是一个积分形式,可以说是较早的 t_1 时刻空间各点上的几率幅的线性叠加,叠加系数是 $\langle \mathbf{r}_2 | U(t_2, t_1) | \mathbf{r}_1 \rangle$. 这一叠加系数可以视作 $U(t_2, t_1)$ 在位置表象中的“矩阵元”.

作个类比. 在波动力学中有 Huygens 原理: 在 t_2 时刻空间某个点 P 处的振幅来自于较早的 t_1 时刻的波前上每个点的振动传递到 P 点的振幅的叠加.

传播子的定义是

$$\boxed{K(2, 1) = \langle \mathbf{r}_2 | U(t_2, t_1) | \mathbf{r}_1 \rangle} \quad (8)$$

时空点 (t_2, \mathbf{r}_2) 处的波函数表示为

$$\psi(\mathbf{r}_2, t_2) = \int d^3r_1 K(2, 1) \psi(\mathbf{r}_1, t_1)$$

传播子在能量表象中的形式

传播子是时间演化算子 $U(t_2, t_1)$ 在位置表象中的“矩阵元”. 为了使这个形象的理解更为具体,我们可以选择能量表象,用哈密顿量的本征向量作为基向量.

$$H |u_j\rangle = E_j |u_j\rangle$$

这里假设哈密顿量的本征值是离散的,不过可以有无穷多个. 对于能谱呈连续分布的情形,只需要把求和替换为积分,在下面讨论自由粒子的传播子的时候可以看到这一点.

哈密顿量的本征向量 $|u_j\rangle$ 在位置表象中有相应的波函数 $u_j(\mathbf{r})$. 传播子被表示为

$$\begin{aligned} K(2, 1) &= \langle \mathbf{r}_2 | U(t_2, t_1) | \mathbf{r}_1 \rangle \\ &= \sum_{j,k} \langle \mathbf{r}_2 | u_j \rangle \langle u_j | U(t_2, t_1) | u_k \rangle \langle u_k | \mathbf{r}_1 \rangle \end{aligned}$$

上式中的 $\langle u_j | U(t_2, t_1) | u_k \rangle$ 不过是 $U(t_2, t_1)$ 在能量表象中的矩阵元. 如果哈密顿量不显含时间,那么

$$U(t_2, t_1) = e^{-iH(t_2-t_1)/\hbar}$$

于是 $U(t_2, t_1)$ 具有对角形式,

$$\langle u_j | U(t_2, t_1) | u_k \rangle = e^{-iE_k(t_2-t_1)/\hbar} \delta_{jk}$$

传播子又被改写为

$$\boxed{K(2, 1) = \sum_k u_k^*(\mathbf{r}_1) u_k(\mathbf{r}_2) e^{-iE_k(t_2-t_1)/\hbar}} \quad (9)$$

传播子满足的方程

首先注意到传播子只负责描述从 t_1 时刻到 t_2 时刻的演化,即 $t_2 > t_1$, 所以,把 $K(2, 1)$ 写为

$$K(2, 1) = \theta(t_2 - t_1) \sum_k u_k^*(\mathbf{r}_1) u_k(\mathbf{r}_2) e^{-iE_k(t_2-t_1)/\hbar}$$

其中 $\theta(x)$ 是阶梯函数,当 $x < 0$ 时为零,当 $x \geq 0$ 时为 1.

然后, 对 $K(2, 1)$ 中下标为 2 的参量作用以 Schrödinger 算子 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(\mathbf{r}_2, -i\hbar\nabla_2)$, 其中 ∇_2 是针对 \mathbf{r}_2 的梯度算子. 注意到 $\frac{\partial\theta(t_2-t_1)}{\partial t_2} = \delta(t_2 - t_1)$, 有

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(\mathbf{r}_2, -i\hbar\nabla_2) \right] K(2, 1) = i\hbar\delta(t_2 - t_1) \sum_k u_k^*(\mathbf{r}_1) u_k(\mathbf{r}_2) e^{-iE_k(t_2-t_1)/\hbar}$$

上式右端有 δ 函数 $\delta(t_2 - t_1)$, 与求和中的指数函数一起, 构成

$$\delta(t_2 - t_1) e^{-iE_k(t_2-t_1)/\hbar} = e^{iE_k \cdot 0/\hbar} \delta(t_2 - t_1) = \delta(t_2 - t_1)$$

这里用到了 δ 函数的一个性质

$$f(x)\delta(x - x_0) = f(x_0)\delta(x - x_0)$$

所以 $K(2, 1)$ 满足的方程是

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(\mathbf{r}_2, -i\hbar\nabla_2) \right] K(2, 1) = i\hbar\delta(t_2 - t_1) \sum_k u_k^*(\mathbf{r}_1) u_k(\mathbf{r}_2) = i\hbar\delta(t_2 - t_1)\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \quad (10)$$

上面的最后一步用到了完备性 (或封闭性) 条件

$$\sum_k u_k^*(\mathbf{r}_1) u_k(\mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$$

方程 (10) 的解是 Green 函数.

一维自由粒子的传播子

一维自由粒子的哈密顿量是

$$H = \frac{P^2}{2m}$$

我们要计算的传播子是

$$K(2, 1) = \left\langle x_2 \left| \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H(t_2 - t_1) \right\} \right| x_1 \right\rangle$$

选择动量表象, 有如下过程.

$$\begin{aligned} K(2, 1) &= \int dp_1 \left\langle x_2 \left| \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H(t_2 - t_1) \right\} \right| p_1 \right\rangle \langle p_1 | x_1 \rangle \\ &= \int dp_1 e^{-ip_1^2(t_2-t_1)/2m\hbar} \langle x_2 | p_1 \rangle \langle p_1 | x_1 \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_1 \exp \left\{ -\frac{ip_1^2(t_2 - t_1)}{2m\hbar} + \frac{ip_1(x_2 - x_1)}{\hbar} \right\} \\ &= \left\{ \frac{m}{2\pi i\hbar(t_2 - t_1)} \right\}^{1/2} \exp \left\{ \frac{im(x_2 - x_1)^2}{2\hbar(t_2 - t_1)} \right\} \end{aligned} \quad (11)$$

这就得到了自由粒子的传播子.

设初态波函数是 Gauss 波包,

$$\psi(x_1, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp \left(-\frac{x_1^2}{4\sigma^2} \right) \quad (12)$$

可以验证, 上式位置空间中的波函数变换到动量空间后的形式也是一个 Gauss 波包, 具体形式是

$$\left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/4} \sqrt{\sigma} e^{-p^2\sigma^2} \quad \text{这里令 } \hbar = 1$$

位置算子 X 的标准方差是 σ , 动量算子 P 的标准方差是 $\frac{1}{2\sigma}$, 有不确定关系

$$\Delta X \Delta P = \frac{1}{2}$$

考虑处于 $\psi(x_1, 0)$ 的自由粒子随时间的演化. 利用传播子, 对 x_1 积分后, 得到 t 时刻的波函数.

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \frac{1}{\xi} \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2\xi^2}\right) \tag{13}$$

其中

$$\xi = \left(1 + \frac{i\hbar t}{2m\sigma^2}\right)^{1/2}$$

图 1 描绘了 $t = 0$ 时刻以及以后某个时刻的几率密度 $|\psi|^2$, 从中可以看出几率分布随时间的扩展.

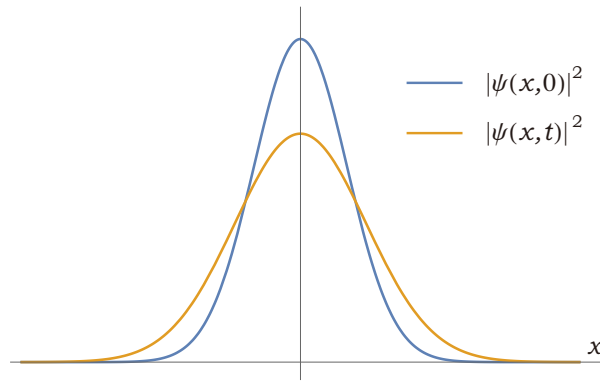


图 1: 初态为 Gauss 波包的自由粒子在初始时刻和 t 时刻的几率密度

还可以计算谐振子的传播子, 参看 Sakurai 书第 2 章 2.5 节, Propagators and Feynman path integrals.

一个需要注意的地方: 不宜用时间演化算子的展开形式代替传播子的计算.

参看

- B. R. Holstein, A. R. Swift, Spreading Wave Packets—A Cautionary Note. American Journal of Physics **40**, 829-832 (1972).
- K. Mita, Dispersion of non-Gaussian free particle wave packets. American Journal of Physics **75**, 950-953 (2007).

相干态

说相干态的目的:

- 在光学实验中, 相干态很重要.
- 建立经典和量子的类比.

这里, 主要讨论类比.

与经典谐振子的类比

类比的对象是, 量子谐振子的位置, 动量和哈密顿量的期望值. 希望看到的是, 这些期望值随时间的变化如同经典谐振子的位置, 动量和哈密顿量随时间的变化.

说到期望值, 就要有量子态. 于是找到一个特定的量子态 $|\psi\rangle$, 满足上述要求.

谐振子的本征态 $|n\rangle$ 不是我们要找的量子态, 因为 $\langle n|X|n\rangle = \langle n|P|n\rangle = 0$.

以下内容来自 Cohen 书 Complement G_V.

经典情形

经典谐振子的运动方程

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}x(t) &= \frac{1}{m}p(t) \\ \frac{d}{dt}p(t) &= -m\omega^2x(t)\end{aligned}$$

为了将要进行的和量子情形的类比, 令

$$\tilde{x}(t) = \beta x(t), \quad \tilde{p}(t) = \frac{1}{\hbar\beta}p(t), \quad \beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

运动方程重写为

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\tilde{x}(t) &= \omega\tilde{p}(t) \\ \frac{d}{dt}\tilde{p}(t) &= -\omega\tilde{x}(t)\end{aligned}$$

定义

$$\alpha(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{x}(t) + i\tilde{p}(t)) \quad (14)$$

关于 $\alpha(t)$ 的运动方程

$$\frac{d\alpha(t)}{dt} = -i\omega\alpha(t) \implies \alpha(t) = \alpha_0 e^{-i\omega t}$$

其中 α_0 是初条件,

$$\alpha_0 = \alpha(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\tilde{x}(0) + i\tilde{p}(0)] \quad (15)$$

相空间中的运动就是

$$\tilde{x}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha_0 e^{-i\omega t} + \alpha_0^* e^{i\omega t}] \quad (16)$$

$$\tilde{p}(t) = -\frac{i}{\sqrt{2}}[\alpha_0 e^{-i\omega t} - \alpha_0^* e^{i\omega t}] \quad (17)$$

哈密顿量是守恒量, 可以用 $t = 0$ 时的 α_0 表示,

$$\begin{aligned}H &= \frac{1}{2m}p(0)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x(0)^2 \\ &= \frac{\hbar\omega}{2}[\tilde{x}(0)^2 + \tilde{p}(0)^2] \\ &= \hbar\omega|\alpha_0|^2\end{aligned} \quad (18)$$

引入 $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{x}(t) + i\tilde{p}(t))$, 用 $\alpha(t)$ 表示位置, 动量和哈密顿量, 这就是以上对经典谐振子的讨论.

量子情形

考虑期望值 $\langle X \rangle(t)$, $\langle P \rangle(t)$, $\langle H \rangle(t)$. 用升降算子表示位置, 动量和哈密顿量.

$$\tilde{X} = \beta X = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger), \quad \tilde{P} = \frac{1}{\hbar\beta} P = -\frac{i}{\sqrt{2}}(a - a^\dagger)$$

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

接着考虑升降算子的期望值随时间的变化,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle a \rangle(t) = \langle [a, H] \rangle(t)$$

注意到 $[a, H] = \hbar\omega[a, N] = \hbar\omega a$, 有

$$i \frac{d}{dt} \langle a \rangle(t) = \omega \langle a \rangle(t) \implies \langle a \rangle(t) = \langle a \rangle(0) e^{-i\omega t}$$

其中 $\langle a \rangle(0)$ 由初条件决定, $\langle a \rangle(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle \tilde{X} \rangle(0) + i\langle \tilde{P} \rangle(0))$.

类似地, 对于升算子 a^\dagger , 有

$$\langle a^\dagger \rangle(t) = \langle a^\dagger \rangle(0) e^{i\omega t} = \langle a \rangle^*(0) e^{i\omega t}$$

位置和动量的期望值可以表示为

$$\langle \tilde{X} \rangle(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\langle a \rangle(0)e^{-i\omega t} + \langle a \rangle^*(0)e^{i\omega t}]$$

$$\langle \tilde{P} \rangle(t) = -\frac{i}{\sqrt{2}}[\langle a \rangle(0)e^{-i\omega t} - \langle a \rangle^*(0)e^{i\omega t}]$$

哈密顿量的期望值不随时间变化,

$$\langle H \rangle = \hbar\omega \langle a^\dagger a \rangle(0) + \frac{\hbar\omega}{2} \quad (19)$$

与经典情形比较.

经典谐振子

$$\tilde{x}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha_0 e^{-i\omega t} + \alpha_0^* e^{i\omega t}]$$

$$\tilde{p}(t) = -\frac{i}{\sqrt{2}}[\alpha_0 e^{-i\omega t} - \alpha_0^* e^{i\omega t}]$$

$$H = \hbar\omega |\alpha_0|^2$$

量子谐振子

$$\langle \tilde{X} \rangle(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\langle a \rangle(0)e^{-i\omega t} + \langle a \rangle^*(0)e^{i\omega t}]$$

$$\langle \tilde{P} \rangle(t) = -\frac{i}{\sqrt{2}}[\langle a \rangle(0)e^{-i\omega t} - \langle a \rangle^*(0)e^{i\omega t}]$$

$$\langle H \rangle = \hbar\omega \langle a^\dagger a \rangle(0) + \frac{\hbar\omega}{2}$$

为了使得在任意时刻位置和动量的期望值都能对应于经典情形, 就应该有

$$\langle \tilde{X} \rangle(t) = \tilde{x}(t), \quad \langle \tilde{P} \rangle(t) = \tilde{p}(t)$$

这就是说, 我们要找的量子态 $|\psi\rangle$ 应该给出

$$\langle a \rangle(0) = \langle \psi | a | \psi \rangle = \alpha_0$$

对于哈密顿量, 我们看到 (18) 和 (19) 存在零点能 $\frac{\hbar\omega}{2}$ 的差异, 这是经典力学与量子力学的本质上差异. 我们只能希望

$$\langle a^\dagger a \rangle (0) = |\alpha_0|^2$$

这也就是

$$\langle \psi | a^\dagger a | \psi \rangle = |\alpha_0|^2$$

于是有确定 $|\psi\rangle$ 的两个条件 (可以有相因子的差异):

$$\langle \psi | a | \psi \rangle = \alpha_0 \tag{20}$$

$$\langle \psi | a^\dagger a | \psi \rangle = |\alpha_0|^2 \tag{21}$$

目前并不能说这两个条件是等价的. 如果 $|\psi\rangle$ 是 a 的本征态, 那么这两个条件等价.

现在根据这两个条件确定 $|\psi\rangle$, 将看到 $|\psi\rangle$ 确实是 a 的本征态.

相干态是 a 的本征态 定义

$$b(\alpha_0) = a - \alpha_0 \mathbb{1}$$

以下省略 1.

$$b^\dagger(\alpha_0)b(\alpha_0) = a^\dagger a - \alpha_0 a^\dagger - \alpha_0^* a + \alpha_0^* \alpha_0$$

计算 $b(\alpha_0)|\psi\rangle$ 的模方,

$$\langle \psi | b^\dagger(\alpha_0)b(\alpha_0) | \psi \rangle = \langle \psi | a^\dagger a | \psi \rangle - \alpha_0 \langle \psi | a^\dagger | \psi \rangle - \alpha_0^* \langle \psi | a | \psi \rangle + \alpha_0^* \alpha_0$$

cf. (20) and (21)

$$= |\alpha_0|^2 - \alpha_0 \alpha_0^* - \alpha_0^* \alpha_0 + \alpha_0^* \alpha_0$$

$$= 0$$

表明 $b(\alpha_0)|\psi\rangle$ 的模为零, 因此

$$b(\alpha_0)|\psi\rangle = 0 \implies a|\psi\rangle = \alpha_0|\psi\rangle$$

于是, 得到这样的结论:

能够对应于经典谐振子运动行为的量子态是降算子 a 的本征态.

以下, 用 $|\alpha\rangle$ 表示 a 的本征态, 又称为相干态. 相干态满足本征方程

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

在进一步讨论相干态的性质之前, 考虑电磁场与谐振子的关系.

来自电磁场的考虑

无源空间中的 Maxwell 方程,

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$$

从中可以得到

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0, \quad \nabla^2 \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0 \quad (22)$$

其中 c 是光速, $c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}}$

驻波

首先考虑被限制在长度为 L 的共振腔中的电磁场, 如图 2 所示.

电磁波的传播方向设为 z 方向, 即波矢 $\mathbf{k} = k \mathbf{e}_z$. 这里只讨论最简单的情况: 电磁波处于简正模 (normal mode), 电场方向沿 x 方向, $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_x(z, t) \mathbf{e}_x$. 简正模指的是满足驻波条件的波, 即波长 $\lambda = \lambda_n = \frac{2L}{n}$, $n = 1, 2, \dots$, 如图 2 所示, 或者用角频率表示为

$$\omega = \omega_n = \frac{n\pi c}{L}$$

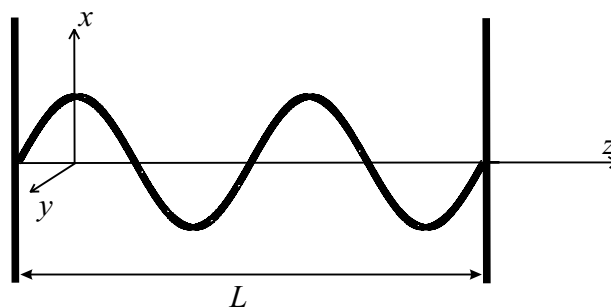


图 2

从方程 (22) 可以解出 $\mathbf{E} = E_x(z, t)$,

$$E_x(z, t) = \left(\frac{2\omega^2 m}{V\epsilon_0} \right)^{1/2} q(t) \sin(kz), \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{c} \quad (23)$$

这里的 k 和 ω 分别是简正模的波矢大小和角频率, 省略了下标 n .

注(关于电场表达式中的振幅) 在电场的表达式 (23) 中, 振幅看起来很繁杂. 之所以有如此形式, 是为了将电磁场的能量和谐振子的能量进行比较.

首先希望电场的表达式中出现具有长度量纲的量, 而且, 在得到电磁场能量的时候, 需要计算积分

$$\frac{1}{2} \int_V \epsilon_0 E_x^2(z, t) dv$$

其中 $dv = dx dy dz$. 希望得到的结果是 $\frac{1}{2} m \omega^2 q^2$. 正是为了这个目的, 才有如此形式的振幅, 其中,

- m 是一个具有质量量纲的常数, 引入该常数的目的是为了和谐振子比较.

• $q(t)$ 是简正模的振幅, 具有长度量纲. 将 (23) 代入 (22), 可以得到 $q(t)$ 满足的方程,

$$\ddot{q}(t) + \omega^2 q(t) = 0$$

这个方程形如谐振子的位置满足的微分方程. ■

注意到 (23) 式具有驻波的特点: 在空间任何一点, 振幅不随时间变化, 保持为 $\sin(kz)$.

空腔中磁场的磁感应强度 \mathbf{B} 的方向沿 y 方向, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = B_y(z, t)\mathbf{e}_y$, 从 Maxwell 方程可以得到

$$B_y(z, t) = \left(\frac{2\omega^2 m}{V\epsilon_0} \right)^{1/2} \left(\frac{\mu_0 \epsilon_0}{k} \right) \dot{q}(t) \cos(kz)$$

其中 $\dot{q}(t)$ 具有速度的量纲, 令 $p = m\dot{q}$, 将 p 视作正则动量. 磁场 $B_y(z, t)$ 重新表示为

$$B_y(z, t) = \left(\frac{2\omega^2}{V\epsilon_0 m} \right)^{1/2} \left(\frac{\mu_0 \epsilon_0}{k} \right) p(t) \cos(kz) \quad (24)$$

空腔中电磁场的哈密顿量是

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \int_V dv \left[\epsilon_0 E_z^2(z, t) + \frac{1}{\mu_0} B_y^2(z, t) \right] \\ &= \frac{1}{2m} p^2(t) + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2(t) \end{aligned} \quad (25)$$

电磁场的哈密顿量具有谐振子的形式.

行波

将上述关于驻波情形的讨论推广到行波情形. 仍然假设电磁场被限制在长度为 L 的区域内, 电场方向沿 x 方向. 电磁波满足周期性条件, 即

$$L = n\lambda, \quad k = k_n = \frac{2\pi n}{L}, \quad n = 1, 2, \dots$$

可以从电场 \mathbf{E} 的方程 (22) 出发, 将电场表示为右行波和左行波的叠加. 也可以考虑矢量势 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ 满足的方程,

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0$$

选择 Coulomb 规范

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$$

给出 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_x(z, t)\mathbf{e}_x$, 其中

$$A_x(z, t) = A(t)e^{ikz} + A^*(t)e^{-ikz}$$

复振幅 $A(t)$ 由谐振方程确定,

$$\frac{d^2 A(t)}{dt^2} + \omega^2 A(t) = 0, \quad \omega = ck \quad (26)$$

$$A(t) = A e^{-i\omega t}, \quad A = A(0) \quad (27)$$

所以

$$A_x(z, t) = A e^{i(kz - \omega t)} + A^* e^{-i(kz - \omega t)}$$

电场和磁场的表达式:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= E_x(z, t)\mathbf{e}_x \\ E_x(z, t) &= i\omega[Ae^{i(kz-\omega t)} - A^*e^{-i(kz-\omega t)}] \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= B_y(z, t)\mathbf{e}_y \\ B_y(z, t) &= \frac{i\omega}{c}[Ae^{i(kz-\omega t)} - A^*e^{-i(kz-\omega t)}]\end{aligned}$$

电磁场的能量

$$H = \frac{1}{2} \int_V \left(\epsilon_0 E^2 + \frac{1}{\mu_0} B^2 \right) dv$$

上面的积分主要是对 z 从 0 到 L 积分, 注意到周期性边界条件 $k = k_n = \frac{2\pi n}{L}$, 使得 A^2 和 A^{*2} 项积分为零. 然后得到

$$H = 2\epsilon_0 V \omega^2 A A^* \quad (28)$$

这里的 A 是 (27) 式中的 $A(0)$, 是初条件. 能量是守恒量, 不随时间改变, 由初条件决定.

量子化

前面讨论了经典电磁场的驻波情形和行波情形.

驻波情形

$$\begin{aligned}E_x(z, t) &= \left(\frac{2\omega^2 m}{V\epsilon_0} \right)^{1/2} q(t) \sin(kz) \\ B_y(z, t) &= \left(\frac{2\omega^2}{V\epsilon_0 m} \right)^{1/2} \left(\frac{\mu_0 \epsilon_0}{k} \right) p(t) \cos(kz) \\ H &= \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2\end{aligned}$$

行波情形

$$\begin{aligned}E_x(z, t) &= i\omega[Ae^{i(kz-\omega t)} - A^*e^{-i(kz-\omega t)}] \\ B_y(z, t) &= \frac{i\omega}{c}[Ae^{i(kz-\omega t)} - A^*e^{-i(kz-\omega t)}] \\ H &= 2\epsilon_0 V \omega^2 A A^*\end{aligned}$$

驻波情形的量子化 将位置和动量视作算子, $q \rightarrow Q, p \rightarrow P$. 定义降算子 (或湮灭算子) a 和升算子 (或者产生算子) a^\dagger ,

$$a(t) = \frac{1}{(2\hbar\omega)^{1/2}} \left(\sqrt{m}\omega Q(t) + \frac{iP(t)}{\sqrt{m}} \right), \quad a^\dagger(t) = \frac{1}{(2\hbar\omega)^{1/2}} \left(\sqrt{m}\omega Q(t) - \frac{iP(t)}{\sqrt{m}} \right) \quad (29)$$

这里, 应该在 Heisenberg 图像中理解 Q, P, a 和 a^\dagger 随时间的演化. 给出场算子

$$\begin{aligned}E_x(z, t) &= \sqrt{\frac{\hbar\omega}{V\epsilon_0}} (a(t) + a^\dagger(t)) \sin(kz) \\ B_y(z, t) &= \frac{1}{ic} \sqrt{\frac{\hbar\omega}{V\epsilon_0}} (a(t) - a^\dagger(t)) \cos(kz) \\ H &= \hbar\omega \left(a^\dagger(t)a(t) + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(a^\dagger(0)a(0) + \frac{1}{2} \right)\end{aligned}$$

行波情形的量子化 出现在场强和哈密顿量中的 A 实际上是 $t = 0$ 时刻的 $A(0)$, 所以, 令

$$A = \frac{1}{2\omega(\epsilon_0 V)^{1/2}} \left[\sqrt{m}\omega q(0) + \frac{ip(0)}{\sqrt{m}} \right], \quad A^* = \frac{1}{2\omega(\epsilon_0 V)^{1/2}} \left[\sqrt{m}\omega q(0) - \frac{ip(0)}{\sqrt{m}} \right]$$

这里的 $q(0)$ 和 $p(0)$ 是初始时刻的正则坐标和正则动量. 能量可以表示为

$$H = 2\epsilon_0 V \omega^2 A A^* = \frac{1}{2m} p^2(0) + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2(0)$$

再作量子化. 定义初始时刻的升降算子,

$$a(0) = \frac{1}{(2\hbar\omega)^{1/2}} \left(\sqrt{m}\omega Q(0) + \frac{iP(0)}{\sqrt{m}} \right), \quad a^\dagger(0) = \frac{1}{(2\hbar\omega)^{1/2}} \left(\sqrt{m}\omega Q(0) - \frac{iP(0)}{\sqrt{m}} \right) \quad (30)$$

把 A 视作算子, 有

$$A = \left(\frac{\hbar}{2\omega\epsilon_0 V} \right)^{1/2} a(0), \quad A^\dagger = \left(\frac{\hbar}{2\omega\epsilon_0 V} \right)^{1/2} a^\dagger(0),$$

场算子表示为

$$E(z, t) = i \left(\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 V} \right)^{1/2} [a(0)e^{i(kz-\omega t)} - a^\dagger(0)e^{-i(kz-\omega t)}]$$

$$B(z, t) = \frac{i}{c} \left(\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 V} \right)^{1/2} [a(0)e^{i(kz-\omega t)} - a^\dagger(0)e^{-i(kz-\omega t)}]$$

Hamilton 量

$$H = \hbar\omega \left[a^\dagger(0) a(0) + \frac{1}{2} \right]$$

可以在 Heisenberg 图像中给出 a 和 a^\dagger 随时间的演化,

$$a(t) = a(0)e^{-i\omega t}, \quad a^\dagger(t) = a^\dagger(0)e^{i\omega t}$$

哈密顿量的本征态 $|n\rangle$ 被称为粒子数态. 场算子在 $|n\rangle$ 上的期望值为零, 没有表现出可以与经典电磁场类比的现象.

相干态 $|\alpha\rangle$ 的性质

现在讨论相干态 $|\alpha\rangle$ 的性质. 首先需要知道相干态更为具体的形式, 用谐振子哈密顿量的本征态 $|n\rangle$ 展开 $|\alpha\rangle$.

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n(\alpha) |n\rangle$$

用 a 左乘两端, 有

$$a |\alpha\rangle = \sum_n c_n(\alpha) \sqrt{n} |n-1\rangle$$

而 $a |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle$, 于是有递推关系

$$c_{n+1}(\alpha) = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} c_n(\alpha)$$

并且有

$$c_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0(\alpha)$$

这表明, 如果 c_0 确定了, 那么所有的展开系数也随之确定 (有相因子的差异). 将 c_0 选择为正实数, 并考虑归一化条件,

$$\sum_n |c_n(\alpha)|^2 = 1$$

$$|c_0(\alpha)|^2 \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |c_0(\alpha)|^2 e^{|\alpha|^2} = 1$$

$$c_0(\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2}$$

最终有

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (31)$$

处于相干态的粒子的能量

如果观测处于状态 $|\alpha\rangle$ 的谐振子的能级, 那么得到结果 $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ 的几率是

$$p_n(\alpha) = |c_n(\alpha)|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2} \quad (32)$$

这是 Poisson 分布. 图 3 描绘了 α 取不同实数值时的 Poisson 分布.

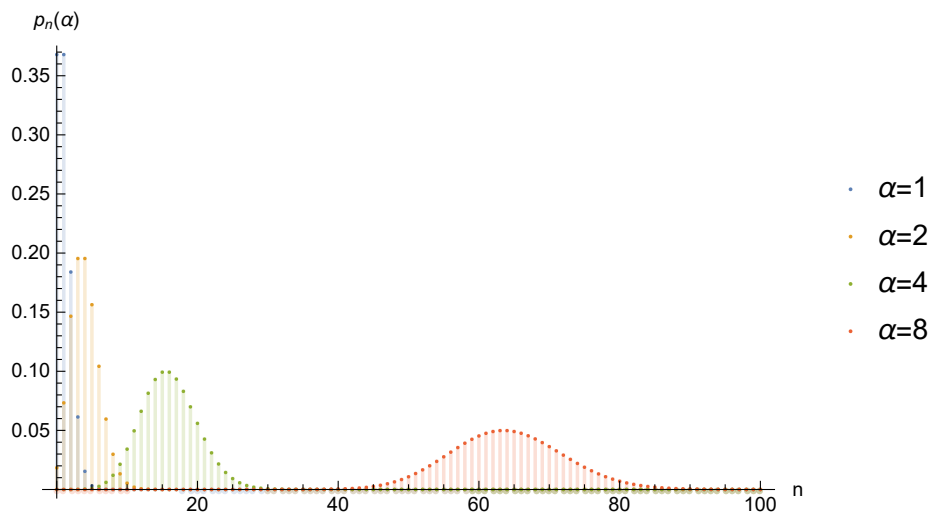


图 3: Poisson 分布 (32).

可以看到, 当 $n \sim \alpha^2$ 时几率 p_n 达到最大. 这是因为

$$p_n(\alpha) = \frac{|\alpha|^2}{n} p_{n-1}(\alpha)$$

当 n 等于 $|\alpha|^2$ 的整数部分的时候, 几率 $p_n(\alpha)$ 达到最大值, 这个几率最大的能级约为

$$E_{\text{most probabilistic}} \sim \hbar\omega \left(|\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right) \quad (33)$$

接着看哈密顿量的期望值

$$\begin{aligned} \langle H \rangle(\alpha) &= \sum_{n=0}^{\infty} p_n(\alpha) \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \\ &= e^{-|\alpha|^2} \left[|\alpha|^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(|\alpha|^2)^{n-1}}{(n-1)!} + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \right] \hbar\omega \end{aligned}$$

$$= \hbar\omega \left(|\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right)$$

当然,最简单的办法是,注意到 $\langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle = \alpha^* \alpha$, 从而有

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

与 (33) 式比较, 当 α 很大的时候,

$$\langle H \rangle (\alpha) \sim E_{\text{most probabilistic}}$$

这表明当 α 很大时, 粒子主要处于能级 $E_{\text{most probabilistic}}$.

再看看 H 的标准方差.

$$\begin{aligned} \langle H^2 \rangle &= \hbar^2 \omega^2 \langle \alpha | \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)^2 | \alpha \rangle \\ &= \hbar^2 \omega^2 \left[|\alpha|^4 + 2|\alpha|^2 + \frac{1}{4} \right] \end{aligned}$$

标准方差

$$\Delta H(\alpha) = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = \hbar\omega |\alpha|$$

比较期望值和标准方差, 发现, 当 $|\alpha|$ 很大的时候, 有

$$\frac{\Delta H(\alpha)}{\langle H \rangle (\alpha)} \sim \frac{1}{|\alpha|} \ll 1$$

这同样说明粒子的能量分布比较集中.

相干态随时间的演化

设 $t = 0$ 时谐振子处于某个相干态 $|\alpha_0\rangle$, 考虑随时间的演化.

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= |\alpha_0\rangle = e^{-|\alpha_0|^2/2} \sum_n \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\ |\psi(t)\rangle &= e^{-|\alpha_0|^2/2} \sum_n \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \\ &= e^{-i\omega t/2} e^{-|\alpha_0|^2/2} \sum_n \frac{\alpha_0^n e^{-in\omega t}}{\sqrt{n!}} |n\rangle \end{aligned}$$

$|\psi(t)\rangle$ 和 $|\alpha_0\rangle$ 的区别仅仅在于, 将 α_0 换成 $\alpha_0 e^{-i\omega t}$, 再乘以整体相因子 $e^{-i\omega t/2}$.

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} |\alpha_0 e^{-i\omega t}\rangle \quad (34)$$

初态为相干态的谐振子, 在任意时刻的量子态仍然是相干态.

力学量的期望值

在本节一开始的时候说过, 当量子谐振子处于相干态的时候, 力学量的期望值可以与经典谐振子类比. 现在看来, 只需要让 a 的本征值 α 等于经典谐振子在 $t = 0$ 时刻的 α_0 (关于经典谐振子的 $\alpha(t)$ 和 α_0 , 见 (14) 和 (15)). 因此, 令量子谐振子的初态是相干态 $|\alpha_0\rangle$, 在 t 时刻, 谐振子的量子态由 (34) 式给出. 现在计算 t 时刻力学量的期望值.

位置算子 X 的期望值,

$$X = \frac{1}{\sqrt{2}\beta}(a + a^\dagger), \quad \beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$\langle X \rangle(t) = \langle \psi(t) | X | \psi(t) \rangle = \langle \alpha_0 e^{-i\omega t/2} | X | \alpha_0 e^{-i\omega t/2} \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}[\alpha_0 e^{-i\omega t}] \quad (35)$$

动量算子 P 的期望值

$$P = -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}}\beta(a - a^\dagger)$$

$$\langle P \rangle(t) = \langle \psi(t) | P | \psi(t) \rangle = \langle \alpha_0 e^{-i\omega t/2} | P | \alpha_0 e^{-i\omega t/2} \rangle = \sqrt{2\hbar m\omega} \operatorname{Im}[\alpha_0 e^{-i\omega t}] \quad (36)$$

回顾经典谐振子的位置和动量, 即 (16) 式和 (17) 式, 可以看出经典和量子的类比.

不确定关系

相干态满足最小不确定关系. 在 (34) 式给出的 t 时刻的量子态 $|\psi(t)\rangle$ 中, X^2 和 P^2 的期望值分别是

$$\langle X^2 \rangle(t) = \frac{\hbar}{2m\omega} \left(4[\operatorname{Re}(\alpha_0 e^{-i\omega t})]^2 + 1 \right)$$

$$\langle P^2 \rangle(t) = \frac{\hbar m\omega}{2} \left(1 - 4[\operatorname{Im}(\alpha_0 e^{-i\omega t})]^2 \right)$$

结合前面得到的期望值, 有标准方差,

$$\Delta X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad \Delta P = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}$$

它们与时间无关. 不确定关系是

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

与谐振子的基态一样, 相干态 $|\alpha\rangle$ 满足最小不确定关系.

相空间的平移变换

曾经说过, 动量算子是位置平移变换的生成元, 位置算子是动量平移变换的生成元. 现在, 将二者结合在一起, 有相空间中的平移变换.

考虑如下形式的算子,

$$D(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a}$$

$$= \exp \{ \operatorname{Re}(\alpha)(a^\dagger - a) + i \operatorname{Im}(\alpha)(a^\dagger + a) \}$$

$$= \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (p_0 X - x_0 P) \right\}$$

因此, 算子 $D(\alpha)$ 又记作 $D(x_0, p_0)$,

$$D(x_0, p_0) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (p_0 X - x_0 P) \right\}$$

其中

$$x_0 = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re}(\alpha), \quad p_0 = \sqrt{2\hbar m\omega} \operatorname{Im}(\alpha) \quad (37)$$

我们会交替使用 $D(\alpha)$ 和 $D(x_0, q_0)$.

$D(\alpha)$, 或者 $D(x_0, q_0)$, 是酉算子, 是相空间的平移算子.

$$D(x_0, p_0) X D^\dagger(x_0, p_0) = X - x_0 \mathbb{1}$$

$$D(x_0, p_0) P D^\dagger(x_0, p_0) = P - p_0 \mathbb{1}$$

可以将 $D(\alpha)$ 表示为另一种形式. 因为 $[a, a^\dagger] = 1$, 所以可以利用公式

$$\text{如果 } [A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0, \text{ 那么} \quad (39)$$

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{[A,B]/2}$$

得到

$$D(\alpha) = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} e^{\alpha^* a}$$

考虑用 $D(\alpha)$ 作用于谐振子的基态 $|0\rangle$,

$$\begin{aligned} D(\alpha) |0\rangle &= e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle \\ &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle \\ &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \end{aligned} \quad (40)$$

与 (31) 比较, 有

$$|\alpha\rangle = D(\alpha) |0\rangle \quad (41)$$

相干态是在相空间中对谐振子基态进行平移变换的结果.

相干态在位置表象中的波函数

在位置表象中表示 $|\alpha\rangle$, 也就是

$$\psi_\alpha(x) = \langle x | \alpha \rangle = \langle x | D(\alpha) | 0 \rangle \quad (42)$$

用 X 和 P 表示 $\alpha a^\dagger - \alpha^* a$,

$$\alpha a^\dagger - \alpha^* a = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(\frac{\alpha - \alpha^*}{\sqrt{2}} \right) X - \frac{i}{\sqrt{\hbar m\omega}} \left(\frac{\alpha + \alpha^*}{\sqrt{2}} \right) P$$

然后利用公式 (39), 将 $D(\alpha)$ 改写为

$$D(\alpha) = e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} = \exp \left\{ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{\alpha - \alpha^*}{\sqrt{2}} X \right\} \exp \left\{ -\frac{i}{\sqrt{\hbar m\omega}} \frac{\alpha + \alpha^*}{\sqrt{2}} P \right\} \exp \left\{ \frac{\alpha^{*2} - \alpha^2}{4} \right\}$$

代入 (42), 有

$$\begin{aligned}
\psi_\alpha(x) &= \exp\left\{\frac{\alpha^{*2} - \alpha^2}{4}\right\} \left\langle x \left| \underbrace{\exp\left\{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{\alpha - \alpha^*}{\sqrt{2}} X\right\}}_{\text{作用于左矢 } \langle x|} \exp\left\{-\frac{i}{\sqrt{\hbar m\omega}} \frac{\alpha + \alpha^*}{\sqrt{2}} P\right\} \right| 0 \right\rangle \\
&= \exp\left\{\frac{\alpha^{*2} - \alpha^2}{4}\right\} \exp\left\{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{\alpha - \alpha^*}{\sqrt{2}} x\right\} \left\langle x \left| \underbrace{\exp\left\{-\frac{i}{\sqrt{\hbar m\omega}} \frac{\alpha + \alpha^*}{\sqrt{2}} P\right\}}_{\text{空间平移算子, 作用于 } |x\rangle} \right| 0 \right\rangle \\
&= \exp\left\{\frac{\alpha^{*2} - \alpha^2}{4}\right\} \exp\left\{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{\alpha - \alpha^*}{\sqrt{2}} x\right\} \left\langle x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha + \alpha^*) \left| 0 \right. \right\rangle \\
&= \exp\left\{\frac{\alpha^{*2} - \alpha^2}{4}\right\} \exp\left\{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{\alpha - \alpha^*}{\sqrt{2}} x\right\} \psi_0\left(x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha + \alpha^*)\right)
\end{aligned} \tag{43}$$

回顾 (35) 和 (36), 可以将 α 用 X 和 P 的期望值表示, 于是有

$$\psi_\alpha(x) = e^{i\theta_\alpha} e^{i\langle P \rangle_\alpha x / \hbar} \psi_0(x - \langle X \rangle_\alpha)$$

其中 $e^{i\theta_\alpha} = e^{\frac{\alpha^{*2} - \alpha^2}{4}}$.

考虑到谐振子基态波函数 $\psi_0(x)$ 的具体形式,

$$\psi_0(x) = \frac{\sqrt{\beta}}{\sqrt[4]{\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\beta^2 x^2\right\}, \quad \beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

将 $\psi_0(x)$ 中的 x 代之以 $x - \langle X \rangle_\alpha$, 有

$$\psi_\alpha(x) = e^{i\theta_\alpha} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left\{-\left[\frac{x - \langle X \rangle_\alpha}{2\Delta X_\alpha}\right]^2 + \frac{i}{\hbar} \langle P \rangle_\alpha x\right\} \tag{44}$$

其中 ΔX_α 是位置算子 X 在相干态 $|\alpha\rangle$ 中的标准方差, $\Delta X_\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} = \frac{1}{\sqrt{2}\beta}$. 几率密度

$$|\psi_\alpha(x)|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{x - \langle X \rangle_\alpha}{\Delta X_\alpha}\right]^2\right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}(\Delta X_\alpha)^2} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{x - \langle X \rangle_\alpha}{\Delta X_\alpha}\right]^2\right\}$$

上式呈现 Gauss 分布的形式.

考虑波函数 $\psi_\alpha(x)$ 随时间的演化. 回顾 (34) 式, 可以看到, 将 (43) 中的 α 代换成 $\alpha e^{-i\omega t}$, 然后再乘以整体相因子 $e^{-i\omega t/2}$, 便得到 t 时刻的波函数 $\psi_\alpha(x, t)$. 这无非是将 (44) 中的 X 和 P 的期望值改换为 t 时刻的期望值, 于是有

$$\psi(x, t) = e^{-i\omega t/2} e^{i\theta_\alpha} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left\{i\frac{x \langle P \rangle(t)}{\hbar}\right\} \exp\left\{-\left[\frac{x - \langle X \rangle(t)}{2\Delta X_\alpha}\right]^2\right\}$$

其中 $\langle X \rangle(t)$ 和 $\langle P \rangle(t)$ 分别由 (35) 和 (36) 确定.

在任意时刻 t , 几率密度 $|\psi(x, t)|^2$ 依旧是 Gauss 分布的形式, 虽然 Gauss 分布的中心 $\langle X \rangle(t)$ 随时间变化, 但是标准方差始终不变.

Overcomplete basis

谐振子的本征态 $|n\rangle$ 构成了 Hilbert 空间的一组基. 相干态 $|\alpha\rangle$ 也可以用作基向量, 不过, 它们不是彼此正交的.

$$|\psi\rangle = \int c(\alpha) |\alpha\rangle d^2\alpha$$

其中

$$d\alpha^2 = d(\operatorname{Re}\alpha) d(\operatorname{Im}\alpha)$$

对应于完备性条件 $\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}$, 相干态满足

$$\boxed{\pi^{-1} \int |\alpha\rangle\langle\alpha| d\alpha = \mathbb{1}} \quad (45)$$

证明上述关系. 利用 (40) 式,

$$\int |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha = \sum_{m,n} \int \frac{\alpha^m \alpha^{*n}}{\sqrt{m!n!}} e^{-|\alpha|^2} d^2\alpha |m\rangle\langle n|$$

注意到

$$\int \frac{\alpha^m \alpha^{*n}}{\sqrt{m!n!}} e^{-|\alpha|^2} d^2\alpha = \pi n! \delta_{m,n}$$

将 α 表示为 $re^{i\theta}$, 并且 $d^2\alpha = r dr d\theta$, 容易证明上面的积分. 于是得到 (45).

酉群上的相干态

以上关于谐振子相干态的讨论可以推广到任意酉群. 设酉变换 U_α 是酉群中的一个元素. 对于 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$,

$$|\psi_\alpha\rangle = U_\alpha |\psi\rangle$$

定义算子 A ,

$$A = \sum_{\alpha} |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha| = \sum_{\alpha} U_\alpha |\psi\rangle\langle\psi| U_\alpha^\dagger$$

算子 A 有这样一个性质, 对于任意某个 U_β ,

$$U_\beta A U_\beta^\dagger = \sum_{\alpha} U_\beta U_\alpha |\psi\rangle\langle\psi| U_\alpha^\dagger U_\beta^\dagger = A$$

因此, A 和 U_β 对易,

$$U_\beta A = A U_\beta$$

如果 U_β 属于群的不可约表示, 那么根据 Schur 引理,

$$A = c \mathbb{1}$$

求迹, 有

$$cd = \sum_{\alpha} \langle\psi_\alpha|\psi_\alpha\rangle := N$$

其中 d 是 Hilbert 空间的维数, N 是群元素的个数. 最终有

$$\sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha| = \frac{N}{d} \mathbb{1}$$

矩阵 $\frac{d}{N} |\alpha\rangle\langle\alpha|$ 便是 POVM 的一个元素.

当 α 连续变化的时候, 有

$$\int d\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = \frac{N}{d} \mathbb{1}$$

对于谐振子来说, 每一个 $|\alpha\rangle$ 来自于相空间的平移变换 $D(\alpha)$ 作用于基态 $|0\rangle$, 空间维数 d 和酉变换 $D(\alpha)$ 的个数都是无穷的. 考察 (45) 式, 它可以表示为

$$\int d\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = \pi \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|$$

设想对上式求迹, 由于 $\text{Tr}(|\alpha\rangle\langle\alpha|) = 1$, 那么左端将给出相干态 $|\alpha\rangle$ 的个数, 也就是酉变换 $D(\alpha)$ 的个数; 右端将给出 $\pi \times$ 空间的维数, 所以 $c = \frac{N}{d} = \pi$.

处于相干态的自由粒子

前面讨论了相干态, 知道了这样的事实: 如果在开始的时候谐振子处于相干态, 那么随后的 (在谐振子的哈密顿量的支配下的) 演化过程中, 谐振子始终处于相干态.

现在考虑这样一个问题: 如果自由粒子的初态是相干态, 那么在自由粒子的哈密顿量的支配下, 相干态如何演化?

在介绍传播子的时候, 我们计算过一个类似的问题: 初态为 Gauss 波包的自由粒子随时间的演化. 图 1 显示, 在时间演化过程中, 几率密度 (即 Gauss 分布) 有弥散, 变矮变宽, 但是几率密度的分布没有前进, 也没有后退, 峰值始终在 $x = 0$ 处. 也就是说, 由 (13) 式给出的波函数不能很好地体现自由粒子的运动.

Gauss 波包相当于谐振子的基态波函数

$$\begin{array}{cc} \text{Gauss 波包} & \text{谐振子的基态} \\ \psi_{\text{Gauss}}(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right) & \psi_0(x) = \frac{\sqrt{\beta}}{\sqrt[4]{\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta^2 x^2\right), \quad \beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \end{array}$$

二者间的关系是 $\frac{1}{\sqrt{2}\sigma} \leftrightarrow \beta$.

考虑相干态. 相干态来自谐振子的基态在相空间中的平移. 位置和动量的平移量分别是 $x_0 \sim \text{Re}(\alpha)$ 和 $p_0 \sim \text{Im}(\alpha)$, 回顾 (37) 式.

设 $t = 0$ 时自由粒子的波函数是 $\psi_\alpha(x_1, 0)$,

$$\psi_\alpha(x_1, 0) = \frac{e^{i\theta_\alpha}}{\sqrt[4]{\pi}} \sqrt{\beta} \exp\left\{-\frac{1}{2}\beta^2(x_1 - \langle X \rangle_\alpha)^2 + \frac{i \langle P \rangle_\alpha x_1}{\hbar}\right\}$$

自由粒子的传播子由 (11) 式给出, 令其中的 t_1 为零,

$$K(x, t; x_1, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{1/2} \exp\left\{\frac{im(x - x_1)^2}{2\hbar t}\right\}$$

t 时刻自由粒子的波函数是

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, t; x_1, 0) \psi_\alpha(x_1, 0) dx_1 \\ &= \frac{e^{i\frac{\pi}{4}} e^{i\theta_\alpha}}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{\sqrt{\beta}}{\xi(t)} \exp\left\{-\frac{\beta^2(x - \langle X \rangle_\alpha)^2}{2\xi^2(t)} + \frac{i \langle P \rangle_\alpha x}{\hbar\xi^2(t)} - \frac{i \langle P \rangle_\alpha t}{2\hbar m\xi^2(t)} - \frac{\beta^2 \langle X \rangle_\alpha \langle P \rangle_\alpha t}{m\xi^2(t)}\right\} \end{aligned}$$

其中 $\xi(t) = \sqrt{1 + \frac{i\hbar\beta^2 t}{m}}$.

这个形式有些繁, 看看几率密度,

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\hbar^2\beta^4 t^2}{m^2}}} \exp\left\{-\frac{\beta^2\left[x - \left(\langle X \rangle_\alpha + \frac{\langle P \rangle_\alpha t}{m}\right)\right]^2}{1 + \frac{\hbar^2\beta^4 t^2}{m^2}}\right\} \quad (46)$$

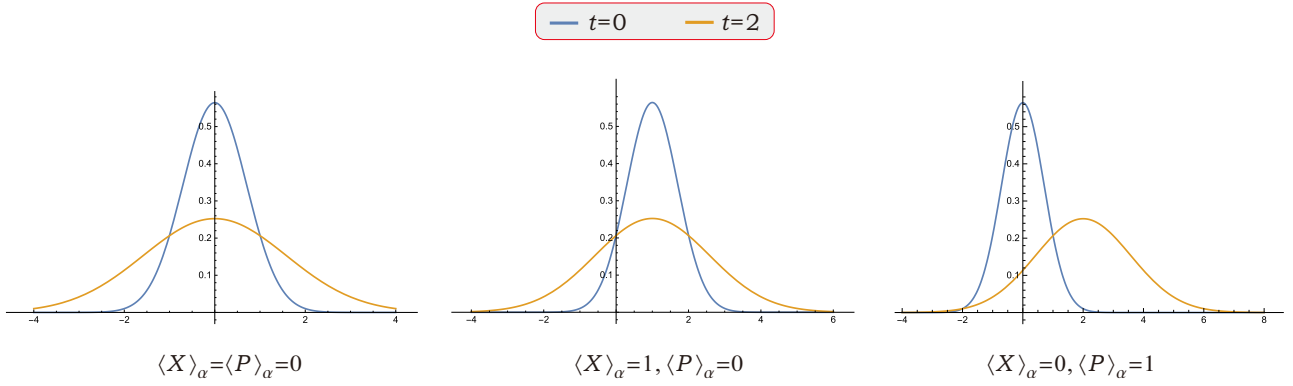


图 4: $\langle X \rangle_\alpha$ 和 $\langle P \rangle_\alpha$ 取不同值时几率密度随时间演化的函数图像。

观察一下 $|\psi(x,t)|^2$ 的函数图像. 在 (46) 式中令 $\hbar = m = \beta = 1$. 图 4 描绘了 $t = 0$ 时和 $t = 2$ 时的几率密度的函数图像.

从图中可以看到:

- 左图, $\langle X \rangle_\alpha = \langle P \rangle_\alpha = 0$. 这相当于 Gauss 波包的演化, 与图 1 是一回事.
- 中图, $\langle X \rangle_\alpha = 1, \langle P \rangle_\alpha = 0$. 自由粒子的初态是对谐振子的基态进行了位置平移的结果, 平移量是 $x_0 = \langle X \rangle_\alpha = 1$. 几率密度随时间的变化与左图类似, 同样没有体现出“运动”的现象.
- 右图, $\langle X \rangle_\alpha = 0, \langle P \rangle_\alpha = 1$. 自由粒子的初态是对谐振子的基态进行了动量平移的结果, 平移量是 $p_0 = \langle P \rangle_\alpha = 1$, 可以看出几率密度有向右行进的现象.

一维氢原子

在课堂上说的内容来自 [1], 似有不妥之处, 以下内容来自 [2]. 其中涉及特殊函数, 参考 [3, 4]

一维氢原子的势能是

$$V(x) = -\frac{e^2}{|x|}$$

如图 5 所示.

哈密顿量的本征函数记作 $\psi(x)$, 满足方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{e^2}{|x|} \psi(x) = E\psi(x) \quad (47)$$

关注束缚态, 能量 $E < 0$.

对方程 (47) 作无量纲化处理. 令

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2\alpha^2}, \quad x = \frac{1}{2}\alpha a_0 z, \quad \alpha > 0 \quad (48)$$

其中 a_0 是 Bohr 半径, $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$. 方程 (47) 改写为

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} - \frac{1}{4}\psi + \frac{\alpha}{|z|}\psi = 0 \quad (49)$$

回顾 $l = 0$ 时三维氢原子径向波函数 $u(r)$ 的方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u(r)}{dr^2} - \frac{e^2}{r}u(r) = Eu(r) \quad (50)$$

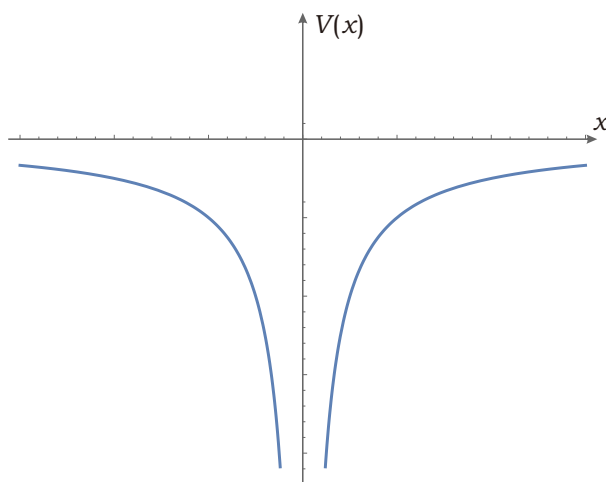


图 5

与一维氢原子的方程 (47) 类似. 但是, 这里还不能立即将三维氢原子的结论用于一维氢原子, 因为后者的势能不是连续的. 需要考虑一些特殊函数的内容.

在 $z > 0$ 区域

当 $z > 0$ 时, 令 $\psi(z) = e^{-\frac{\alpha}{2}z} w(z)$, 代入方程 (49), 有

$$z \frac{d^2 w}{dz^2} - z \frac{dw}{dz} + \alpha w = 0 \quad (51)$$

合流超几何函数 (Confluent Hypergeometric function)

微分方程

$$z \frac{d^2 F}{dz^2} + (\gamma - z) \frac{dF}{dz} - \alpha F = 0 \quad (52)$$

有两个线性无关的解:

$$\Phi(\alpha, \gamma; z), \quad z^{1-\gamma} \Phi(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma; z) \quad (53)$$

其中 Φ 叫作合流超几何函数, 级数表示是

$$\Phi(\alpha, \gamma; z) = 1 + \frac{\alpha z}{\gamma 1!} + \frac{\alpha(\alpha+1) z^2}{\gamma(\gamma+1) 2!} + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2) z^3}{\gamma(\gamma+1)(\gamma+2) 3!} + \dots \quad (54)$$

有时候, 合流超几何函数又被记作 ${}_1F_1(\alpha, \gamma; z)$.

将 (53) 式中的两个线性无关解组合为另一类型的合流超几何函数,

$$\Psi(\alpha, \gamma; z) = \frac{\Gamma(1-\gamma)}{\Gamma(\alpha-\gamma+1)} \Phi(\alpha, \gamma; z) + \frac{\Gamma(\gamma-1)}{\Gamma(\alpha)} z^{1-\gamma} \Phi(\alpha-\gamma+1, 2-\gamma; z)$$

当 $z \rightarrow \infty$ 时渐近行为,

$$\Phi \xrightarrow{z \rightarrow \infty} e^z, \quad \Psi \xrightarrow{z \rightarrow \infty} z^{-\alpha}$$

回到方程 (51), 与方程 (52) 比较, 可知该方程的解是 $\Phi(-\alpha, 0; z)$ 或者 $\Psi(-\alpha, 0; z)$. 因而一维氢原子的本征函数可以表示

为

$$\psi(z) \sim e^{-\frac{1}{2}z} \Phi(-\alpha, 0; z), \quad \text{或者} \quad \psi(z) \sim e^{-\frac{1}{2}z} \Psi(-\alpha, 0; z)$$

这里没有考虑归一化常数.

注意到 $z \rightarrow \infty$ 时的渐近行为, 在 $z > 0$ 区域, 应该选择

$$\psi(z) \sim e^{-\frac{1}{2}z} \Psi(-\alpha, 0; z) := W_\alpha(z), \quad z > 0 \quad (55)$$

现在分析 $W_\alpha(z)$, 主要是想看看函数 $\Psi(-\alpha, 0; z)$ 的具体形式.

函数 $\Psi(\alpha, n+1; z)$ 的一种表示形式

当 $\Psi(\alpha, \gamma; z)$ 中的 γ 取正整数的时候, 函数有如下形式

$$\begin{aligned} \Psi(\alpha, n+1; z) = & \frac{(-1)^{n+1}}{n! \Gamma(\alpha - n)} \left[\Phi(\alpha, n+1; z) \ln z \right. \\ & \left. + \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_r z^r}{(n+1)_r r!} \left\{ \varphi(\alpha+r) - \varphi(1+r) - \varphi(1+n+r) \right\} \right] \\ & + \frac{(n-1)!}{\Gamma(\alpha)} z^{-n} \Phi(\alpha-n, 1-n; z)_n \end{aligned} \quad (56)$$

其中

- $n = 0, 1, 2, \dots$, 上式最后一项中 Φ 的下标 n 的意思是, 在 Φ 的级数表示 (54) 中, 求和只求到第 n 项. 当 $n = 0$ 时, 该项理解为零.
- $(\alpha)_r, (n+1)_r$ 之类的定义是

$$(c)_r = c(c+1)(c+2)\cdots(c+r-1), \quad (c)_0 \equiv 1$$

- 函数 φ 的定义是

$$\varphi(s) = \frac{d}{ds} \ln \Gamma(s) = \frac{\Gamma'(s)}{\Gamma(s)}$$

在 [3, 4] 中, 该函数是用 ψ 表示的, 这里为了避免与波函数混淆, 改用符号 φ 表示.

上述关于 $\Psi(\alpha, n+1; z)$ 的形式并不适用于我们关注的 $\Psi(-\alpha, 0; z)$, 因为 $n+1$ 不能等于零. 还需要一个公式:

$$\Psi(\alpha, \gamma; z) = z^{1-\gamma} \Psi(1+\alpha-\gamma, 2-\gamma; z)$$

于是, 令 $\gamma = 0$, 有

$$\Psi(-\alpha, 0; z) = z \Psi(1-\alpha, 2; z)$$

重写 (55) 式中的 $W_\alpha(z)$,

$$W_\alpha(z) = e^{-\frac{1}{2}z} z \Psi(1-\alpha, 2; z) \quad (57)$$

利用 (56), 再将 $W_\alpha(z)$ 表示为如下形式,

$$W_\alpha(z) = \frac{e^{-\frac{1}{2}z}}{\Gamma(-\alpha)} \left\{ -\frac{1}{\alpha} + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(1-\alpha)_r}{r!(r+1)!} A_r z^{r+1} + \left[\ln z + \varphi(1-\alpha) - \varphi(1) - \varphi(2) \right] \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(1-\alpha)_r}{r!(r+1)!} z^{r+1} \right\} \quad (58)$$

其中

$$A_r = \sum_{k=0}^{r-1} \left(\frac{1}{k+1-\alpha} - \frac{1}{k+1} - \frac{1}{k+2} \right)$$

在得到 (58) 的过程中, 需要利用函数 Φ 的级数展开形式, 并且利用公式

$$\varphi(s+1) = \varphi(s) + \frac{1}{s}$$

至此, 得到 $z > 0$ 区域内波函数的表示,

$$\psi_+(z) = B_+ W_\alpha(z), \quad z > 0 \quad (59)$$

其中 B_+ 是归一化常数.

$z < 0$ 区域

将 $z > 0$ 区域的波函数中的 z 换为 $-z$, 得到 $z < 0$ 区域的波函数,

$$\psi_-(z) = B_- W_\alpha(-z), \quad z < 0 \quad (60)$$

其中 B_- 是归一化常数.

接着应该考虑在 $z = 0$ 处波函数的连续性.

连续性与边界条件

在 $z = 0$ 处, 波函数应该连续. 但是, 由于势能不是连续的, 故不能要求波函数的导数也是连续的.

注 如果势能是有限的, 那么从 **Schrödinger** 方程可以看到, ψ'' 也是有限的, 从而 ψ' 是连续的. 如果势能存在奇点, 那么, 针对 ψ' 的可能的边界条件则依赖于势能奇点的性质, 并且要从 **Schrödinger** 方程推出. 例如, 对于无限深方势阱, 没有关于 ψ' 的边界条件, 只有关于波函数的边界条件, 即 $\psi = 0$. 对于 δ 势, 波函数 ψ 是连续的, **Schrödinger** 方程决定了 ψ' 的非连续性. ■

在 $z = 0$ 处波函数连续, 这要求 $\psi_+(0) = \psi_-(0)$. 根据 (58), (59) 和 (60), 有

$$-\frac{1}{\alpha} \frac{B_+}{\Gamma(-\alpha)} = -\frac{1}{\alpha} \frac{B_-}{\Gamma(-\alpha)}$$

这里, 假定 $\alpha \neq 0$. 这是因为, $E = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2\alpha^2}$, 如果 $\alpha = 0$, 那么有 $E \rightarrow -\infty$, 这不合理.

又注意到

$$\lim_{\alpha \rightarrow N} \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} = 0, \quad N = 0, 1, 2, \dots$$

因此有两种情况需要考虑: $\alpha =$ 正整数 和 $\alpha \neq$ 正整数.

当 α 不等于正整数时

此时 $\frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \neq 0$, 于是有边界条件

$$B_+ = B_- = B \quad (61)$$

在这种情况下, 波函数是连续的. 能级由 (48) 式确定,

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2\alpha^2} \quad (62)$$

其中 α 的取值是连续的: 除了正整数以外的所有正实数. 能级呈连续分布. 由于 $N - 1 < \alpha < N, N = 1, 2, \dots$, 因此用两个正整数 $N - 1$ 和 N 标记能级, 将其写为 $E_{N-1,N}$, 并且将能量本征态写为

$$\psi_{N-1,N}(z) = B_{N-1,N} W_\alpha(|z|) \tag{63}$$

其中 $W_{N-1,N}(|z|)$ 的函数图像如图 6 所示.

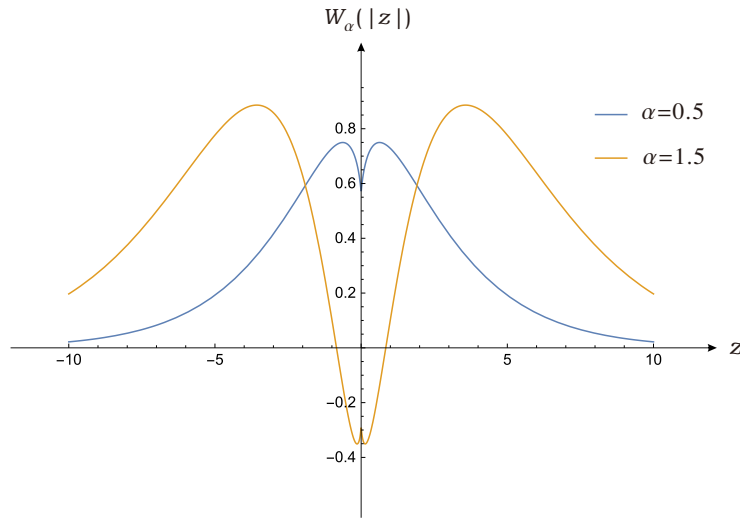


图 6: $W_\alpha(|z|)$ 的函数图像, 其中 α 分别取值 0.5 和 1.5.

小结: 当 α 不等于正整数时

- 能级 $E_{N-1,N}$ 呈连续分布.
- 能量本征函数 $\psi_{N-1,N}(z)$ 是连续函数, 是偶函数.
- 能级 $E_{N-1,N}$ 并没有简并.
- 除了在原点处, $\psi_{N-1,N}(z)$ 是可导的. 在原点处 $\psi_{N-1,N}(z)$ 的斜率为无穷大. 考察由 (58) 式给出的 $W_\alpha(z)$, 有

$$\psi_{N-1,N}(z) \xrightarrow{|z| \rightarrow 0} \frac{B_{N-1,N}}{\Gamma(-\alpha)} \left[-\frac{1}{\alpha} + |z| \ln |z| + \mathcal{O}(z) \right]$$

在原点处的导数

$$\psi'_{N-1,N}(z) \xrightarrow{|z| \rightarrow 0} \frac{B_{N-1,N}}{\Gamma(-\alpha)} \text{sgn}(z) \ln |z|$$

其中 $\text{sgn}(z)$ 是 z 的符号. 如果假设 $B_{N-1,N} > 0$, 那么 $\psi_{N-1,N}(z)$ 在原点右侧的斜率是 $-\infty$, 在原点左侧的斜率是 $+\infty$.

- 可以将能量本征函数 $\psi_{N-1,N}(z)$ 归一化, 并给出归一化常数.

当 α 等于正整数 N 时

需要考虑如下两件事情:

- 由 (58) 式给出的 $W_\alpha(z)$ 会有怎样的形式.
- 边界条件是怎样的.

分析 $W_\alpha(z)$

将 (58) 中的 α 换成 N ,

$$W_N(z) = \frac{e^{-\frac{1}{2}z}}{\Gamma(-N)} \left\{ -\frac{1}{N} + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(1-N)_r}{r!(r+1)!} A_r z^{r+1} + \left[\ln z + \varphi(1-N) - \varphi(1) - \varphi(2) \right] \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(1-N)_r}{r!(r+1)!} z^{r+1} \right\} \quad (64)$$

注意到

$$\Gamma(s)\Gamma(1-s) = \pi \csc(\pi s) \implies \Gamma(-N) = -\frac{\pi \csc(N\pi)}{\Gamma(1+N)} = -\frac{\pi \csc(N\pi)}{N!} \longrightarrow \pm\infty \quad (\text{见图 7})$$

$$\varphi(1) = -\gamma, \quad \gamma = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{4} + \cdots + \frac{1}{m} - \ln m \right) \approx 0.5772$$

$$\varphi(N) = -\gamma + \sum_{k=1}^{N-1} \frac{1}{k} \quad (\text{表明 } \varphi(N) \text{ 是有限的})$$

$$\varphi(1-s) = \varphi(s) + \pi \cot(\pi s) \implies \varphi(1-N) = \varphi(N) + \pi \cot(N\pi) \longrightarrow \pm\infty \quad (\text{见图 8})$$

根据上述第一个等式, 有 $\frac{1}{\Gamma(-N)} = 0$.

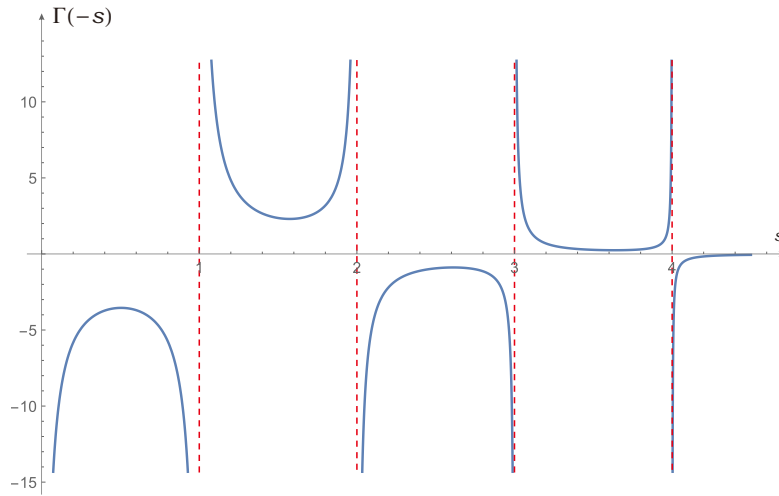


图 7: 函数 $\Gamma(-s)$ ($s > 0$) 的函数图像.

因此, 我们只需考虑 (64) 式中包含在 $\{\dots\}$ 中的无穷大项. 仅有的无穷大项是 $\varphi(1-N)$, 所以将 $W_N(z)$ 改写为

$$W_N(z) = e^{-\frac{1}{2}z} \frac{\varphi(1-N)}{\Gamma(-N)} \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(1-N)_r}{r!(r+1)!} z^{r+1} \quad (65)$$

其中

$$\frac{\varphi(1-N)}{\Gamma(-N)} := \lim_{s \rightarrow N} \frac{\varphi(1-s)}{\Gamma(-s)} = \lim_{s \rightarrow N} \frac{\varphi(s) + \pi \cot(\pi s)}{-\frac{\pi \csc(\pi s)}{s!}} = (-1)^{N+1} N!$$

并且, 当 $r \geq N$ 时 $(1-N)_r$ 等于零, 这表明 (65) 中的求和项的项数是有限的 —— 从 $r = 0$ 到 $r = N - 1$. 最终得到

$$W_N(z) = (-1)^{N+1} N! e^{-\frac{1}{2}z} \sum_{r=0}^{N-1} \frac{(1-N)_r}{r!(r+1)!} z^{r+1} \quad (66)$$

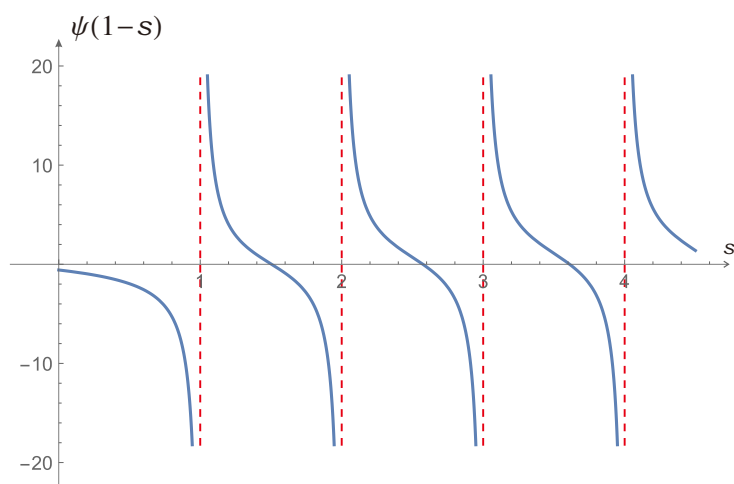


图 8: $\varphi(1-s)$ 的函数图像, 图中函数的符号换成了 ψ .

现在, 我们知道, 当 $\alpha = N$ 时, 在 $z > 0$ 区域和 $z < 0$ 区域, 波函数分别是 $\psi_+(z) = B_+ W_N(z)$, $\psi_-(z) = B_- W_N(-z)$, 其中 $W_N(\pm z)$ 由 (66) 给出.

讨论边界条件

当 $z = 0$ 时, $W_N(0) = 0$, 因此自然有 $\psi_+(0) = \psi_-(z) = 0$, 所以, 波函数在 $z = 0$ 处的连续性条件并没有给出 B_+ 和 B_- 之间的联系. 但是, B_+ 和 B_- 之间的联系是必须要知道的, 因为归一化条件只能确定一个常数.

仿照 δ 势的处理方式: 在原点的邻域 $[-\epsilon, +\epsilon]$ 内对 Schrödinger 方程作积分. 将方程 (49) 中的 α 改写为 N , 从 $-\epsilon$ 到 $+\epsilon$ 对 z 积分, 注意 ϵ 很小.

对 $\frac{d^2\psi}{dz^2}$ 积分,

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{d^2\psi}{dz^2} dz = \psi'_+(+\epsilon) - \psi'_-(-\epsilon)$$

对 ψ 积分, $\psi_{\pm}(z) = B_{\pm} W_N(\pm z)$. 当 $z \rightarrow 0$ 时, $W_N(z) \rightarrow \mathcal{O}(z)$, 所以

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi(z) dz \sim \epsilon^2$$

对 $\frac{\psi}{|z|}$ 积分,

$$\int_0^{+\epsilon} \frac{\psi_+(z)}{z} dz \sim \int_0^{+\epsilon} \frac{\mathcal{O}(z)}{z} dz \sim \epsilon$$

从 $-\epsilon$ 到 0 的积分与此类似. 所以, 当 $\epsilon \rightarrow 0$ 时, 对 Schrödinger 方程的积分给出的结论是

$$\psi'_+(0) = \psi'_-(0)$$

波函数的一阶导数在原点是连续的.

由 (66) 式,

$$\left. \frac{dW_N(z)}{dz} \right|_{z=0} = (-1)^{N+1} N!, \quad \left. \frac{dW_N(-z)}{dz} \right|_{z=0} = -(-1)^{N+1} N!$$

所以

$$\psi'_{\pm}(0) = \pm(-1)^{N+1} N! B_{\pm} \implies B_+ = -B_- \equiv B$$

常数 B 可以由归一化条件获得.

小结: 当 α 等于正整数时

- 波函数在原点处是连续的, 波函数的一阶导数在原点处也是连续的.
- 波函数是奇函数,

$$\psi_N(z) = B_N \operatorname{sgn}(z) W_N(|z|)$$

- 能级是离散的,

$$E_N = -\frac{me^4}{2\hbar^2 N^2}, \quad N = 1, 2, \dots \quad (67)$$

图 9 描绘了 $N = 1$ 和 $N = 2$ 时的波函数图像.

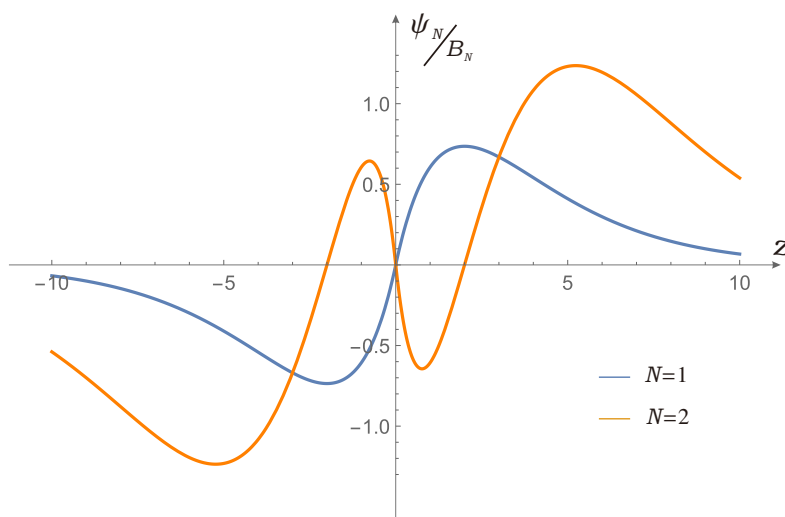


图 9: 当 $N = 1, 2$ 时能量本征函数的图像, 未归一.

一维氢原子的能级

综合以上讨论, 一维氢原子的能级包含两种类型: 一是离散的, 能级由 (67) 给出, 对应的本征函数具有奇宇称; 一是连续的, 能级由 (62) 式给出, 对应的本征函数具有偶宇称. 在两种情况下都没有出现简并. 图 10 描绘了一维氢原子的能级.

References

- [1] R. Loudon, *American Journal of Physics* **27**, 649 (1959).
- [2] L. K. Haines and D. H. Roberts, *American Journal of Physics* **37**, 1145 (1969).
- [3] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publications, Inc., 1970.
- [4] I. Gradshteyn and I. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, Academic Press, 2007.

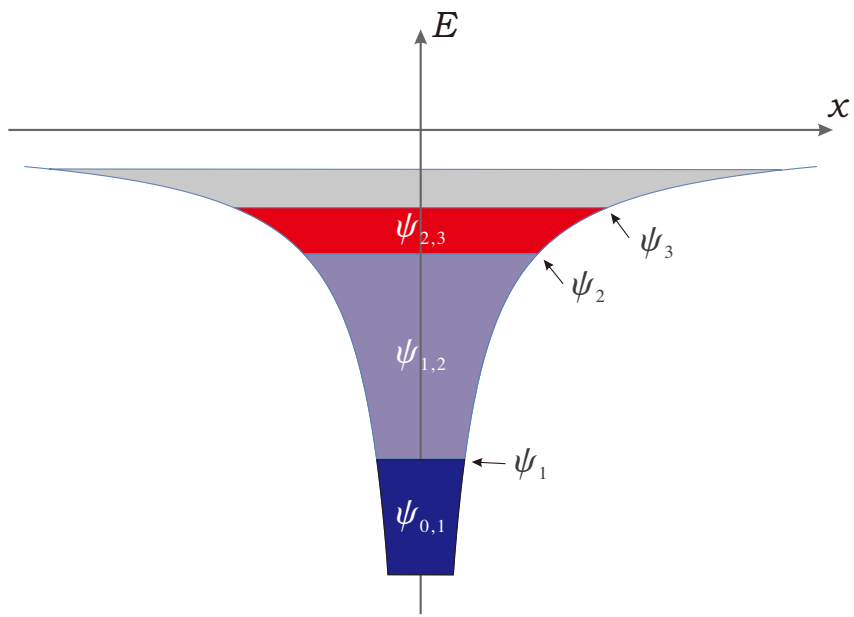


图 10