分数量子中高斯波包的含时演化及谐振子的定态能量本征值

陆岳锋

2021 年 4 月 30 日

1. 分数量子力学
   - 费曼的路径积分
   - Laskin 和他的分数量子力学
2. 分数量子力学方程下的波包演化理论计算及数值模拟
   - $\alpha = 1, k_0 = 0$ 的解析解
   - 数值解
   - 单个波包演化 (图)
   - 两个波包演化（干涉图）
   - 单独把干涉项拿出来看
   - 高斯波包在分数薛定谔方程演化下得出的结论
3. 粒子在定态分数薛定谔方程下的能量本征值

费曼的路径积分

“分形” 一词是由 Mandelbrot[1] 引入科学家的词典中的。从历史上看，第一个物理对象的例子是布朗运动，其轨迹 “路径” 是不可微的。在量子物理学中，应用分形概念的第一个成功尝试是费曼路径积分法在量子力学中的应用。费曼在研究最小作用量原理的时候写出了量子力学的路径积分方法 [2]，将非相对论量子力学重新定义为布朗路径上的路径积分。

$$K_F(x_b t_b \mid x_a t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}_{Feynman} x(\tau) \cdot \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} d\tau\, V(x(\tau)) \right\} \quad (1)$$

式中，$\mathcal{D}_{Feynman} x(\tau)$ 是费曼函数测度。费曼是基于假设粒子的运动是一种布朗运动而最终能得到这个结果的。他的表达式如下，

$$\begin{aligned} &\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}_{\text{Feynman}}\, x(\tau) \ldots = \lim_{N\to\infty} \int dx_1 \ldots dx_{N-1} \left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{-N/2} \\ &\times \prod_{j=1}^{N} \exp\left\{ \frac{im}{2\hbar\varepsilon} \left(x_j - x_{j-1}\right)^2 \right\} \end{aligned} \quad (2)$$

而众所周知，上式能导出标准的量子力学。

Laskin 和他的分数量子力学

Laskin 基于分形理论提出了该表达式的基于 Lévy 飞行的表达式，如下，

$$\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}_{\text{Laskin}}\, x(\tau) \ldots = \lim_{N\to\infty} \int dx_1 \ldots dx_{N-1} \left(\frac{iD_\alpha \varepsilon}{\hbar}\right)^{-N/\alpha} \prod_{j=1}^{N} L_\alpha \left\{ \left(\frac{\hbar}{iD_\alpha \varepsilon}\right)^{1/\alpha} |x_j - x_{j-1}| \right\} \ldots \tag{3}$$

其中 D_α 是广义的 “分数量子扩散系数”，他的单位是 $\mathrm{erg}^{1-\alpha}\mathrm{cm}^{\alpha}\,\mathrm{sec}^{-\alpha}$。$\hbar$ 表示普朗克常数，$x_0 = x_a$，$x_N = x_b$，$\epsilon = \ t_b - t_a\, /N$，Lévy 函数 L_α 用 Fox 的 H 函数表示 [3][?][4]

$$\hbar^{-1}\left(\frac{D_\alpha t}{\hbar}\right)^{-1/\alpha} L_\alpha \left\{ \frac{1}{\hbar}\left(\frac{\hbar}{D_\alpha t}\right)^{1/\alpha} |x| \right\} = \frac{1}{\alpha |x|} H_{2,2}^{1,1}\left[\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\hbar}{D_\alpha t}\right)^{1/\alpha} |\, x| \Big|_{(1,1),(1,\frac{1}{2})}^{(1,1/\alpha),(1,\frac{1}{2})} \right] \tag{4}$$

分数薛定谔方程 I

明显，在 $alpha = 2$ 时，Lévy 分布转换为高斯分布。Lévy 飞行过程转换为布朗随机运动。
其中，α 是 Lévy 系数，他的取值范围是 $1 < \alpha \leqslant 2$。而在这样的函数测度下，我们可以像“标准的”路径积分一样推导出标准薛定谔方程和标准的“非分数”量子力学。因此，Feynman-Hibbs 分数背景导致标准的“非分数”量子力学。
但如果把费曼路径积分中的布朗路径换成 Lévy 路径 [4]，（他们所满足的不尝分布不同）。就会出现分数化的薛定谔方程。

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -D_\alpha(\hbar\nabla)^\alpha\psi + V(x)\psi \tag{5}$$

其中，这个 $(\hbar\nabla)^\alpha$ 的运算规则可以用傅立叶变换定义，

$$(\hbar\nabla)^\alpha\psi(x,t) = -\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{i(px/\hbar)}|p|^\alpha\varphi(p,t) \tag{6}$$

分数薛定谔方程 II

这个工作最初是在 2000 年由 Laskin[5][6][7] 提出。分数化的薛定谔方程在形式上是整数薛定谔方程的泛化，但他所包含的物理内容还有待研究。尤其是怎么在实验上观测到分数量子力学不同于整数量子力学的现象，这便是本文研究的重点。
我们现在考虑最简单的高斯波包演化的情况。

一般地 I

考虑这么一个在 x 空间的波包,

$$\psi(x) = \exp\left[-\sigma\left(x - x_0\right)^2\right]\exp(-ik_0 x) \tag{7}$$

我们希望知道他在分数薛定谔方程下会如何演化，故，我们考虑一个一般的分数的薛定谔方程,

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -D_\alpha(\hbar\nabla)^\alpha\psi + V(x)\psi \tag{8}$$

其中，这个 $(\hbar\nabla)^\alpha$ 的运算规则为

$$(\hbar\nabla)^\alpha\psi(x,t) = -\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{i(px/\hbar)}|p|^\alpha\psi(p,t) \tag{9}$$

所以，对于分数薛定谔方程的计算方法，我们一般考虑直接把整个方程变换到波矢 k 空间去，我们可以这么做：令

一般地 II

Let $D_\alpha = \frac{1}{2}$ and $V = 0, \hbar = 1$ 其中，选择 $D_\alpha = \frac{1}{2}$ 是基于光学实现的一些论文的选择 [8][9][10]。这里也这么选。我们最终会得到：

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi(k) = -\frac{1}{2}|k|^\alpha\psi(k) \tag{10}$$

至此，我们获得了 k 空间的分数薛定谔方程。于是，我们把我们设定的粒子的初态波函数 Eq. 7也变到 k 空间，

$$\frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{\sigma}}e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma}}e^{i(k-k_0)(x_0)} \tag{11}$$

在无外势的分数薛定谔方程下，我们去解这个方程，发现一些奇特的现象。

$\alpha=1, k_0=0$ 的解析解

这边直接给出结果:

$$\begin{aligned}\psi(x)=&\frac{\sqrt{\pi}\,e^{-\sigma(x+f\xi+x_0)^2}}{\sqrt{2}}\left(1+\operatorname{erf}\left(i(x+f\xi+x_0)\sqrt{\sigma}\right)\right)\\&+\frac{\sqrt{\pi}\,e^{-\sigma(x-f\xi+x_0)^2}}{\sqrt{2}}\left(1-i\operatorname{erfi}\left((x-f\xi+x_0)\sqrt{\sigma}\right)\right)\end{aligned} \tag{12}$$

这就是 $\alpha=1, k_0=0$ 时候的自由波包演化解析解。结果表明一个高斯波包的初始波函数会明显得分成两块高斯波包。而且我们发现有虚部，所以他必然还是存在干涉现象的。

数值解

考虑无外势的分数薛定谔方程：

$$
\begin{aligned}
i\frac{\partial\psi}{\partial\xi} &= -f|k|\psi \\
\psi &= e^{if|k|\xi}\psi(\xi=0)
\end{aligned}
\tag{13}
$$

代入初始状态波包的表达式，我们有

$$
\psi = e^{if|k|\xi}\frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{\sigma}}e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma}}e^{-i(k-k_0)(-x_0)} \tag{14}
$$

数值方法就是基于式 14，先把这个式子离散化到一个数列上，对那个数列做傅里叶变换，我们就能得到实空间的波函数的样子。

$\psi - x$ 图

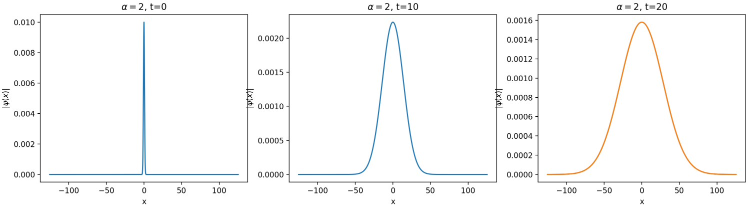

Figure: $\alpha = 2$

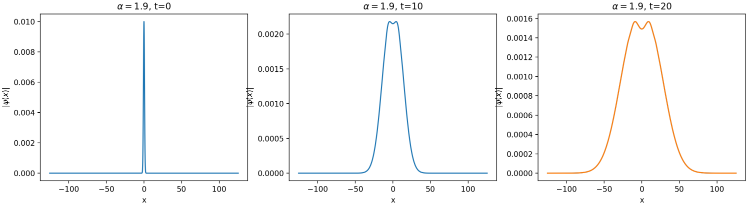

Figure: $\alpha = 1.9$

$\psi - x$ 图

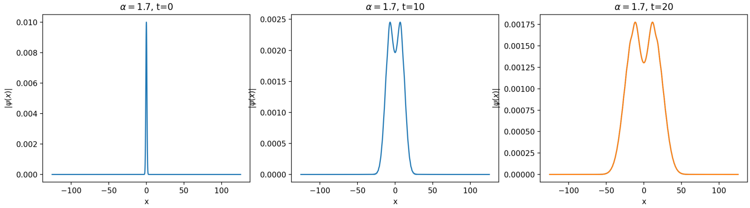

Figure: $\alpha = 1.7$

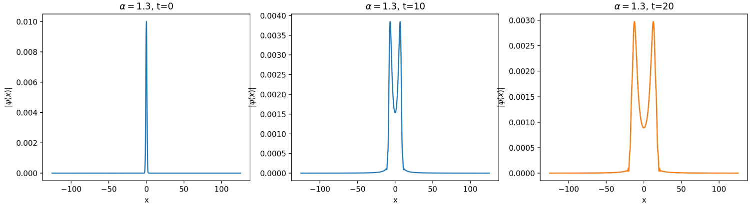

Figure: $\alpha = 1.3$

$\psi - x$ 图

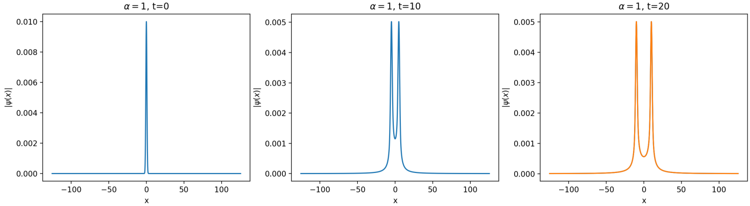

Figure: $\alpha = 1$

$\psi - x$ 图 I

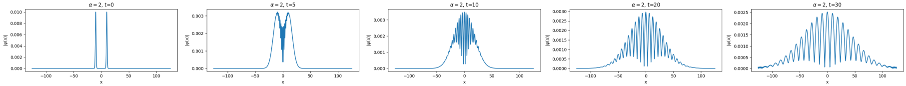

Figure: $\alpha = 2$

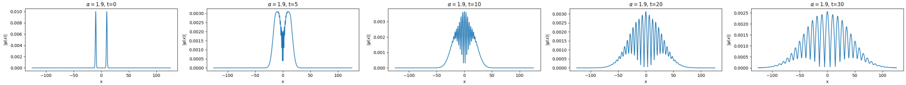

Figure: $\alpha = 1.9$

$\psi - x$ 图 II

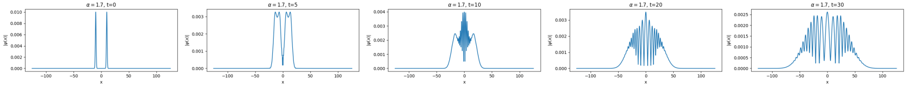

Figure: $\alpha = 1.7$

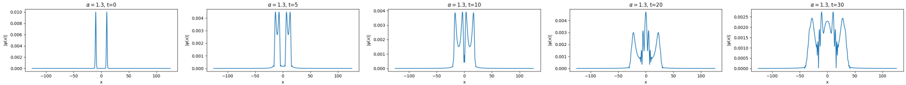

Figure: $\alpha = 1.3$

$\psi - x$ 图 III

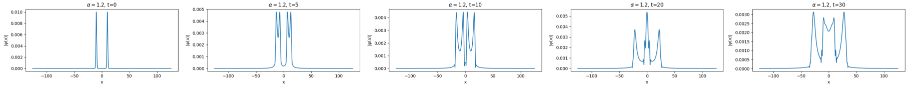

Figure: $\alpha = 1.2$

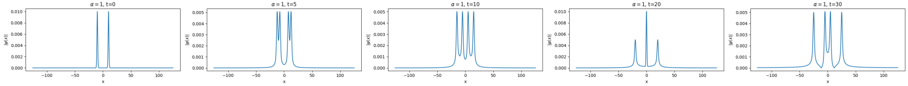

Figure: $\alpha = 1$

干涉热图

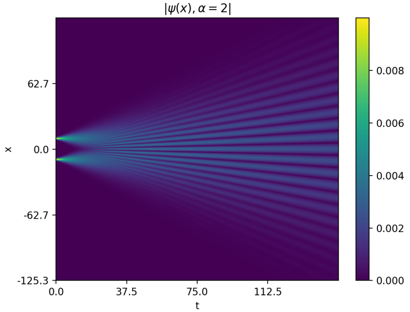

Figure: $\alpha = 2$

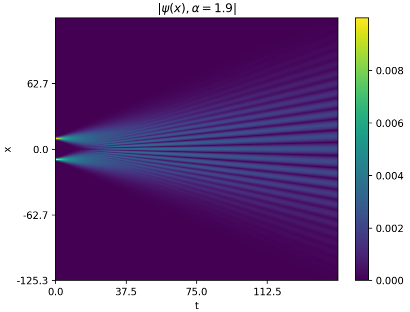

Figure: $\alpha = 1.9$

干涉热图

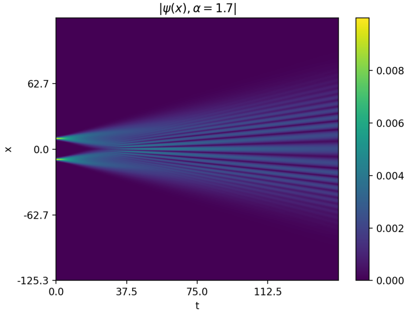

Figure: $\alpha = 1.7$

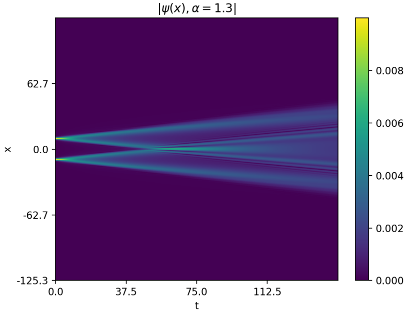

Figure: $\alpha = 1.3$

干涉热图

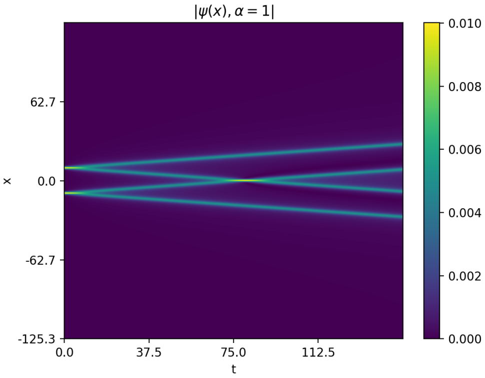

Figure: $\alpha = 1$

单独把干涉项拿出来看 I

这也是本人在研究过程中最惊讶的发现之一，因为在分数薛定谔方程下演化，一个波包分裂成两个，他们之间存在相位差，也就是说他们之间可以相互干涉。我们考虑一个这样的波包，关于 x 轴上的原点对称，也就是 $x_0 = 0$。我们把解析解 Eq. 12和他的共轭相乘再减去两个波包项的平方，留下干涉项如下：

$$e^{-2\sigma\left(f^2\xi^2+x^2+2xx_0+x_0^2\right)}\left(\pi-\pi\operatorname{erfi}\left(\sqrt{\sigma}(-f\xi+x+x_0)\right)\operatorname{erfi}\left(\sqrt{\sigma}(f\xi+x+x_0)\right)\right) \tag{15}$$

我们把这个式子拿出来画个图

单独把干涉项拿出来看 II

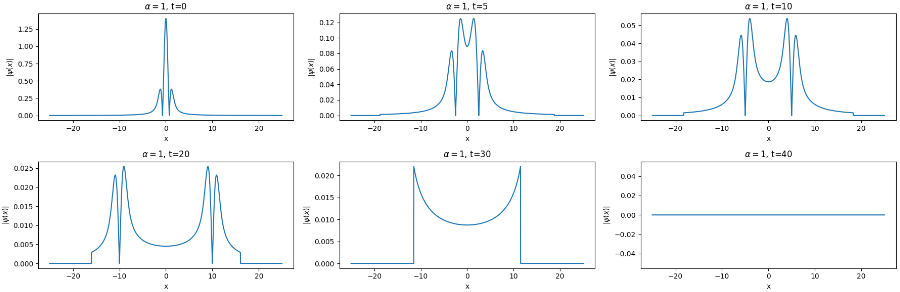

Figure: 单个波包演化的干涉项

单独把干涉项拿出来看 III

从上图中，我们可以看出，在 t=0 时刻干涉最大，之后逐渐递减。
首先来解释为什么在 t=0 时刻干涉最大，因为这时候可以说是两个即将分开的波包重叠在一起，也就是我们平常所说的干涉最强的时刻。
虽然从干涉图形上上看起来像是两个相似形状的东西分开，但我们仔细观察这个纵坐标、也就是这个数量级，我们会发现，随着时间递减非常快，这明显是一种干涉行为。到第六张图，因为计算机精度的原因，所以没法在画图，但干涉曲线应该还是有一点的，故在此说明。
所以，这个干涉条纹的形状可能会变得复杂，但可以肯定的是他的振幅一直在以非常快的速度变小。

高斯波包在分数薛定谔方程演化下得出的结论

综上，我们分析了解析解中 $\alpha = 1$ 的干涉条纹，同时分析了多初始波包和一个波包劈裂后自己和自己干涉的情况，认为在 $\alpha = 1$ 的时候也是存在干涉条纹的，同理可推得在 $1 < \alpha \leq 2$ 的情况下，高斯波包在分数薛定谔方程下演化的时候也是会存在干涉条纹的，只不过在 $\alpha \to 2$ 的时候干涉条纹更明显。

粒子在定态分数薛定谔方程下的能量本征值 I

画图的过程在此不再赘述，在鄙人的毕业论文中有全过程，这边直接给出结果。

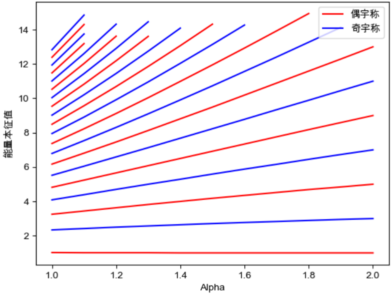

Figure: 数值模拟的结果

粒子在定态分数薛定谔方程下的能量本征值 II

针对不同的 α 我们画了不同的外势图如下，

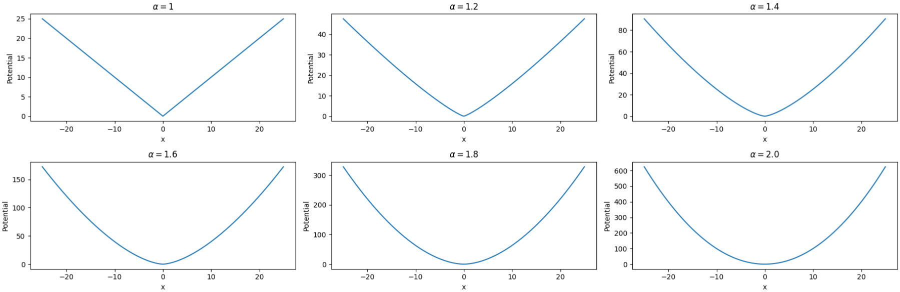

Figure: 不同 α 情况下的外势图

粒子在定态分数薛定谔方程下的能量本征值 III

可以看出来（注意纵坐标），也可以从数学上分析，在 x 处于 $[-1,1]$ 之间的时候（也就是粒子能量特别低的时候），α 越小，外势越大，所以，在图 19所示的基态能量变化中，基态能量随着 α 的变大有越变越小的趋势。
同理，在粒子能量稍微高点之后，也就是 x 在 $[-1,1]$ 区间外的时候，外势随着 α 的增大而增大，所以，，在图 19所示的基态能量变化中，激发态能量随着 α 的变大有明显的越变越大的趋势。

Reference I

JW Cannon.
The fractal geometry of nature. by benoit b. mandelbrot.
The American Mathematical Monthly, 91(9):594–598, 1984.

Richard P Feynman, Albert R Hibbs, and Daniel F Styer.
Quantum mechanics and path integrals.
Courier Corporation, 2010.

C. Fox.
The and functions as symmetrical fourier kernels.
Transactions of the American Mathematical Society, 98:395–429, 1961.

Bruce J. West, Paolo Grigolini, Ralf Metzler, and Theo F. Nonnenmacher.
Fractional diffusion and lévy stable processes.
Phys. Rev. E, 55:99–106, Jan 1997.

Reference II

Nikolai Laskin.
Fractional quantum mechanics and lévy path integrals.
Physics Letters A, 268(4-6):298–305, 2000.

Nick Laskin.
Fractional quantum mechanics.
Physical Review E, 62(3):3135, 2000.

Nick Laskin.
Fractional schrödinger equation.
Physical Review E, 66(5):056108, 2002.

Yiqi Zhang, Hua Zhong, Milivoj R. Belić, Noor Ahmed, Yanpeng Zhang, and Min Xiao.
Diffraction-free beams in fractional schrödinger equation.
Scientific Report, 6:23645, 2016.

Reference III

- Stefano Longhi.
  Fractional schrödinger equation in optics.
  Optics letters, 40(6):1117–1120, 2015.

- Yiqi Zhang, Xing Liu, Milivoj R Belić, Weiping Zhong, Yanpeng Zhang, Min Xiao, et al.
  Propagation dynamics of a light beam in a fractional schrödinger equation.
  Physical review letters, 115(18):180403, 2015.