专题训练题——谐振子与相干态

1 介绍

笔者选择量子物理部分一维谐振子一节的最后的三个问题作为本专题训练题的研究对象，依次为： 1. 一般的谐振子波包如何随时间演化？（数值求解方程并讨论物理现象） 2. 相干态波包的形状为什么保持不变？ 3. 势阱的作用是什么？

2 谐振子波包的振动

课上已经通过级数求解定态薛定谔方程 $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$ 导出，对于质量为m，振动角频率为ω的定态一维谐振子，其定态波函数为

$$\psi_n(x) = N_n H_n(\beta x) e^{-\frac{1}{2}\beta^2 x^2}, \tag{1}$$

其中归一化系数$N_n = \sqrt{\frac{\beta}{\sqrt{\pi}2^n n!}}$，$\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$，$\hbar = \frac{h}{2\pi}$，$h$为普朗克常数。$H_n$为$n$阶厄密多项式，可被定义为简洁的导数形式

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n} e^{-\xi^2}, \tag{2}$$

n可以取不小于零的整数。

能量本征值与n的关系如下

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega. \tag{3}$$

对一般的谐振子波包，其波函数由各定态波函数乘以各自时间演化因子的级数形式给出

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}, \tag{4}$$

其中$c_n \in \mathbb{C}$是展开系数，满足归一化条件 $\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1$。

代入能量满足的表达式(3)，得到一般谐振子波包的波函数为

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t}. \tag{5}$$

因而计算出一般谐振子波包出现的概率密度与位置x和时间t的关系为

$$\begin{aligned}
|\psi(x,t)|^2 &= \psi^*(x,t)\psi(x,t) \\
&= \left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n^* \psi_n(x) e^{i(n+\frac{1}{2})\omega t}\right)\left(\sum_{m=0}^{\infty} c_m \psi_m(x) e^{-i(m+\frac{1}{2})\omega t}\right) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 \psi_n^2(x) + \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n>m}^{\infty} 2\psi_m(x)\psi_n(x)\Re\{c_m c_n^* e^{-i(m-n)\omega t}\} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 \psi_n^2(x) + \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n>m}^{\infty} 2\psi_m(x)\psi_n(x)|c_m c_n^*| \cos((n-m)\omega t + \arg(c_m c_n^*)).
\end{aligned} \tag{6}$$

从中可以看出，对于一般谐振子波包上的每一点能分解成简谐振动的组合，也即概率密度在周期性涨落：

- **平衡位置**是不含时间的前一项，$\sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 \psi_n^2(x)$，是一个大于等于0的值，与一般谐振子包含的定态波函数在这一位置的值有关；
- 体系的**固有角频率** $\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar}(E_m - E_n) = (m-n)\omega$。对这些固有角频率取最大公因数，就是所有位置共享的振动角频率。例如，如果m, n可以取0,1,2，则$|m-n|$可能为1,2，对应两种固有角频率为ω和2ω分量的振动，总体的角频率就是1倍的ω；
- **振幅**的形式由于振动叠加较为复杂。单个的振动的振幅是 $2\psi_m(x)\psi_n(x)|c_m c_n^*|$，可能因定态波函数的节点始终为0，形成概率密度的驻点。

3 一种特殊的谐振子波包：相干态

3.1 相干态在定态下的展开

考虑相干态$|\alpha\rangle$，其满足定义

$$\hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle\,, \tag{7}$$

其中$\hat{a}$是降算符，$\hat{a} \equiv \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\right)$。它是非厄密的，$\alpha \in \mathbb{C}$。

相干态$|\alpha\rangle$在基底下的展开形式为

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\,|n\rangle\,. \tag{8}$$

将(8)代入(7)，有

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{a}\,|n\rangle = \alpha \sum_{n=0}^{\infty} c_n\,|n\rangle\,. \tag{9}$$

由于$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$，逐项比较等号左右两侧$|n\rangle$的系数，有

$$\sqrt{n}c_n = \alpha c_{n-1}, \tag{10}$$

即相干态的展开系数满足递推式$c_n = \frac{\alpha}{\sqrt{n}}c_{n-1}$，因而得到通项公式

$$c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}c_0. \tag{11}$$

根据归一化条件确定c_0：

$$\sum_{n=0}^{\infty}|c_n|^2 = |c_0|^2 \cdot \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(|\alpha|^2)^n}{n!} = |c_0|^2 \cdot e^{|\alpha|^2} = 1, \tag{12}$$

所以取$c_0 = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}$即可满足归一化条件。

于是我们得到了相干态在能量本征态下的展开形式。记本征值为α的相干态在坐标表象下的表示为$\phi_\alpha(x)$，所以可以写成

$$\phi_\alpha(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\psi_n(x) \tag{13}$$

将各级定态波函数ψ_n乘以其时间演化因子$e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t}$，得到含时间相干态波函数

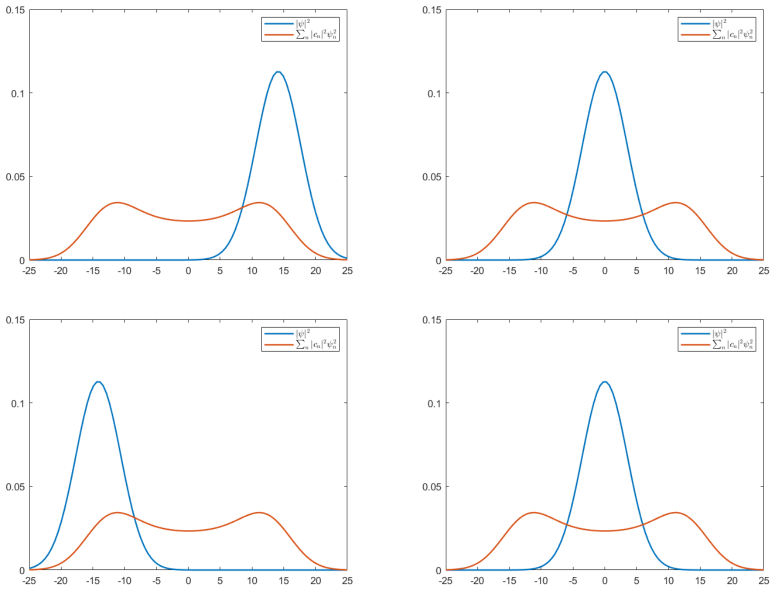
$$\begin{aligned}\phi_\alpha(x,t) &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\psi_n(x)e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t}\\ &= e^{-i\frac{1}{2}\omega t}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\psi_n(x)\\ &= e^{-i\frac{1}{2}\omega t}\phi_{\alpha e^{-i\omega t}}(x).\end{aligned} \tag{14}$$

从中可以看出相干态波函数随时间的演化形式：其本征值以ω的角频率在复平面旋转；在此基础上系数以$\frac{1}{2}\omega$的角频率旋转。

3.2 数值仿真结果

由于相干态的展开系数c_n的分母有$n!$，所以当n很大时趋于0，容易截断处理进行数值仿真验证展开系数计算的正确性。使用Matlab进行数值仿真（源代码 main.m），取$n = 0, \ldots, 29$就已经能够产生一个周期振荡且形状不随时间变化的波包，说明了系数计算的正确性。

下图中的蓝线分别为$t = 0, T/4, T/2, 3T/4$时刻的相干态波包形状以及位置，其中$T = 2\pi/\omega$.



棕线为不同位置波包的平衡位置，可见它关于平衡位置偶对称，且在平衡位置处取极小值，在相干态波包运动的极限位置（波峰能到的距离平衡位置最远的地方）取极大值，在极限位置外又逐渐减小。原因是波包里平衡位置越远的速度越小，波包的峰值经过的时间就越长，所以平衡位置越大；在平衡位置除波包的速度最大，波峰很快经过，剩余时间都是波包的拖尾。极限位置也因为是拖尾才经过所以平衡位置较小。

3.3 相干态在坐标表象下的波函数

上面推出了相干态波函数本征值随时间演化的规律，下面说明本征值的含义，为此求解相干态在坐标表象下的波函数（参考相干态练习题解答）。仍然从定义(7)出发，代入降算符 $\hat{a} \equiv \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\right)$ 以及 $\hat{p} = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$，得到

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta x + \frac{1}{\beta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\phi_\alpha = \alpha\phi_\alpha \Leftrightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\phi_\alpha = \beta(\sqrt{2}\alpha - \beta x)\phi_\alpha, \tag{15}$$

其中$\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$。根据 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\phi_\alpha/\phi_\alpha = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\ln(\phi_\alpha)$，容易解得

$$\phi_\alpha = Ce^{\beta(\sqrt{2}\alpha x - \frac{1}{2}\beta x^2)}. \tag{16}$$

改写$e^{\beta(\sqrt{2}\alpha x - \frac{1}{2}\beta x^2)} = e^{i\sqrt{2}\beta\Im\{\alpha\}x} \cdot e^{-\frac{1}{2}(\beta x - \sqrt{2}\Re\{\alpha\})^2} \cdot e^{\Re\{\alpha\}^2}$，并适当选取归一化系数$C$，可以得到坐标表象下的形式

$$\phi_\alpha = \sqrt{\frac{\beta}{\sqrt{\pi}}}e^{i\Im\{\alpha\}(\Re\{\alpha\}+\sqrt{2}\beta x)}e^{-\frac{1}{2}(\beta x - \sqrt{2}\Re\{\alpha\})^2}, \tag{17}$$

对它取模的平方得到波包概率密度在坐标中的形式，记作$f_\alpha(x)$

$$f_\alpha(x) := |\phi_\alpha|^2 = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-(\beta x - \sqrt{2}\Re\{\alpha\})^2}. \tag{18}$$

可以看出，波包关于$x = \frac{\sqrt{2}\Re\{\alpha\}}{\beta}$ 对称，且在此处取最大值。回顾3.1中得到的结论，含时的谐振子波包的 α 以 ω 的角频率在复平面旋转。不妨取 $\alpha_0 = \alpha(t=0)$ 在实数轴正半轴上，则$\Re\{\alpha\} = \alpha_0 \cos(\omega t)$，而这正是 t 时刻波包位置的平均值，即

$$\langle x(t) \rangle = \alpha_0 \cos(\omega t). \tag{19}$$

此外，波包随时间变化进行平移，即

$$f_\alpha(x,t) = |\phi_\alpha(x,t)|^2 = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} e^{-(\beta x - \sqrt{2}\alpha_0 \cos(\omega t))^2}. \tag{20}$$

至此可以看出相干态波包的形状保持不变的原因：首先，相干态本征值α随时间的演化形式为简谐振动；其次，α的实部与波包相对原点的平移量成正比。所以，相干态波包就像一个弹簧振子一样，在保持形状不变的条件下在平衡位置左右做周期振动。

4 势阱的作用

首先，不像无限深势阱，谐振子势能的形式有更明显的经典对应：弹簧振子势能。此外，由于它的大小与偏离平衡位置的平方成正比，限制了波函数的运动范围，不像平面波能在无界的空间中自由运动，也使其更靠近一个宏观物体可能的运动方式。回顾之前的推导，其实仅用到降算符本征态这样一个条件。势能 $\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 与动能 $\frac{p^2}{2m}$ 构成的哈密顿量系数和幂次合适，能够通过因式分解的方式巧妙地构造出一对升降算符，满足 $H = \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2})$，且 $[a, a^+] = 1$，从而能导出相干态种种的奇妙性质。