

一维氢原子模型中的空间分离

王鑫, 刘天贵, 刘全慧

(湖南大学 物理与微电子科学学院 理论物理研究所, 湖南 长沙 410082)

摘要:一维氢原子模型原始的定义在全空间 $x \in (-\infty, \infty)$, 多年的研究发现, 由于势 $\sim -1/|x|$ 的奇异性比想象严重, 空间被分割成为了两个独立的半无限空间. 在这两个独立的空间中, 分别定义了两个半空间中的氢原子.

关键词:一维氢原子模型; 空间分离; 奇异势能

中图分类号: O 413.1

文献标识码: A

文章编号: 1000-0712(2016)03-0030-04

1 一维氢原子模型, 通常教科书中“标准”处理及其结果

一维氢原子模型指的是一个负电荷 $(-q)$ 在一个质量无限大的正电荷 Q 中的运动, 最简单的情况是 $Q=q=e$ 为电子电荷的绝对值. 电势能为

$$V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qQ}{|x|} = -\frac{k}{|x|}, \quad x \in (-\infty, \infty) \quad (1)$$

其中 $k = qQ/(4\pi\epsilon_0) \rightarrow e^2/(4\pi\epsilon_0)$ 为一正常数, $|x|$ 为正负电荷间的距离. 在量子力学中, 哈密顿算符为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{k}{|x|} \quad (2)$$

定态薛定谔方程为

$$H\psi = E\psi \quad (3)$$

物理学界第一次注意到这个问题是1952年^[1], 后来又反复回到这一问题. 2009年的一篇《论一维库仑问题》^[2]的短文, 列出了54篇相关文献, 而这篇论文现有15篇引用(2015年10月3日 google 数据). 当然, 这些论文不全是、也不可能是这个问题的全部研究论文. 对这个问题的研究兴趣持续不减, 至今(2015年)仍是^[3,4], 既有理论上的原因, 例如它涉及到很现代的概念例如超对称^[2]、重整化^[5]等; 也由于多种物理问题可以用相互作用进行近似处理, 详情可参见文献[2]中的综述部分.

从教学研究的角度看, 对于一维体系, 有3个相关的定理. 定理之一是: 基态无简并且没有节点. 定理之二是: 粒子在对称势场中运动, 那么对于某一能级的定态, 如果没有简并, 则该态具有确定的宇称.

定理之三是: 粒子在充分规则的势场中运动, 如果有束缚态, 则必定不是简并的.

由于一维氢原子模型的势能在 $x=0$ 处奇异, 故不满足定理三; 由于定理二处理的是一般情况, 本质上也要要求势函数充分规则, 所以定理二也不适用. 只剩下定理一, 似乎不能不满足, 但是问题远比预期复杂.

从表面上看, 方程(3)的解可以通过如下过程而获得.

1) 对于非奇异态, 波函数本身及其导数连续, 故 $\psi(0)=0$. 证明如下.

现在处理的是全一维空间 $x \in (-\infty, \infty)$, 而 $x=0$ 是势能 $V(x)$ 的奇点, 也就是系统哈密顿算符的奇点, 这一点的态只能由边值关系来确定. 对式(3)的两边同时积分, 得

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-a}^a \frac{d^2\psi}{dx^2} dx - k \int_{-a}^a \frac{\psi(x)}{|x|} dx = E \int_{-a}^a \psi(x) dx \quad (4)$$

第二个积分是一个广义积分, 需要研究其积分主值

$$\int_{-a}^a \frac{\psi(x)}{|x|} dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(- \int_{-a}^{-\epsilon} \frac{\psi(x)}{x} dx + \int_{\epsilon}^a \frac{\psi(x)}{x} dx \right) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\epsilon}^a \frac{\psi(-x) + \psi(x)}{x} dx \quad (5)$$

这个积分有意义要求满足条件:

$$\psi(0-) + \psi(0+) = 0 \quad (6)$$

另一方面, 波函数本身必须连续, 即

$$\psi(0-) = \psi(0+) = \psi(0) \quad (7)$$

故得

$$\psi(0) = 0 \quad (8)$$

证毕.

* 收稿日期: 2015-08-00; 修回日期: 2015-10-08

基金项目: 国家自然科学基金资助课题(批准号: 11175063); 湖南大学教改基金资助课题.

作者简介: 王鑫(1966-), 女, 河南舞阳人, 湖南大学物电院副教授, 博士.

2) 基态可能是奇异态,可以利用各种渐近过程去逼近这个奇异态.一种方式就是利用如下势能:

$$-\frac{k}{|x|+\alpha}, (\alpha>0); -\frac{k}{\sqrt{x^2+\beta^2}}, (\beta>0) \quad (9)$$

先求出基态,然后让参量 $\alpha \rightarrow 0$, 或者 $\beta \rightarrow 0$, 发现可能存在一个奇异态:

$$\psi_0 = \sqrt{\delta(x)} \quad (10)$$

这个态对应的能量为负无穷大,即

$$E_0 = -\infty \quad (11)$$

3) 哈密顿算符(2)具有一个明显的性质:宇称算符 P 和哈密顿 H 对易,即

$$[H, P] = 0 \quad (12)$$

那么,对于系统非奇异本征态应该具有确定的宇称,或奇,或偶,或奇、偶二重简并.这样,只需要求出半空间($x>0$)中的完备集 $\{\varphi_n(x)\} (n=1, 2, 3, \dots)$.利用这个 $\varphi_n(x)$ 就可构造出全空间的“完备”集,包含了奇宇称解 $\psi_n^{(o)}$ 偶宇称解 $\psi_n^{(e)}$ 两套:

$$\psi_n^{(o)} = \begin{cases} \varphi_n(x) & (x>0) \\ -\varphi_n(-x) & (x<0) \end{cases} \quad (13)$$

$$\psi_n^{(e)} = \begin{cases} \varphi_n(x) & (x>0) \\ \varphi_n(-x) & (x<0) \end{cases} \quad (14)$$

它们构成二重简并态,对应的能量本征值为

$$E_n = -\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2}, \quad (n=1, 2, 3, \dots) \quad (15)$$

也就是通常的氢原子能级.

2 “标准”结果中的一些数学上的困难

1) 数学上,哈密顿算符(2)不是一个自伴算符^[4,5].这个算符从形式上看,是如下算符的极限:

$$H(\alpha) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{k}{|x|+\alpha}, \quad (\alpha>0),$$

$$H(\beta) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{k}{\sqrt{x^2+\beta^2}}, \quad (\beta>0) \quad (16)$$

这两个算符是自伴算符!但是, $H(\alpha \rightarrow 0) \neq H(\alpha = 0)$, 也就是自伴算符的极限完全可以是非自伴算符.如何理解这个“怪异”的现象呢?

一般来说,数学上,极限有3种情况.下面用定义在一个圆域 $r \in [0, 1)$ 内的函数 $f(r)$ 的数值和它在边界 $r=1$ 点处函数值 $f(1)$ 之间的关系来说明.第一种情况最简单, $f(1)$ 极限存在,而这点的极限数值可以通过逼近来获得,有

$$f(1) = f(0.999\dots) \quad (17)$$

第二情况是, $f(1)$ 极限存在,而这点的极限数值不可

以通过逼近来获得,即

$$f(1) \neq f(0.999\dots) \quad (18)$$

一个半径为1的圆形的筛子,就属于这种情况.注意这个筛子是一个理想的数学抽象,边沿不连续地直立向上而底面是圆面,这个边沿的厚度为零.

第三情况是, $r=1$ 根本没有定义,谈论这点的极限数值无意义.一个例子是上面的圆形筛子把边齐根剪掉之后的情况.

很明显,我们碰到一个极为容易忽视的问题,表面上看来,式(2)是式(15)的极限,也就是属于上面的第一种情况,其实不是!当 $\alpha=\beta=0$ 时,算符不是自伴算符,根本不属于自伴算符族 $H(\alpha)$ 或者 $H(\beta)$ 中 $\alpha \rightarrow 0$ 或者 $\beta \rightarrow 0$ 的极限情况.故属于第二种情况式(18).

2) 解集 $\{\psi_0, \psi_n^{(o)}, \psi_n^{(e)}\}$ 并不完备!例如对称点在 $x=0$ 处的高斯分布就无法按这个解集展开.

3) 宇称解 $\{\psi_n^{(o)}\}$ 不满足边界条件(4):

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx = 0 \quad (19)$$

也就是有

$$\psi'(0+) - \psi'(0-) = 0 \quad (20)$$

而把式(14)代入后发现^[6,7]:

$$\psi'(0+) - \psi'(0-) \neq 0 \quad (21)$$

故而应该剔除偶宇称解.

以上3点,不是数学困难的全部,有些问题超出了大学物理的范围,例如来自超选择规则(superselection rule)^[6],超对称势伴(supersymmetric partner)势^[6],等等,可以参看有关专业文献.

3 “标准”结果中的一些物理上的困难

1) 任何波包都不随时间演化.任意构造一个波包:

$$\Phi(x) = a_0\psi_0(x) + \sum_{n=0}^{\infty} \{b_n\psi_n^{(o)} + c_n\psi_n^{(e)}(x)\} \quad (22)$$

直接计算可得它不仅概率流密度为零,而且位置和动量的期待值为零:

$$j(0) = 0, \quad \langle x \rangle = 0, \quad \langle p \rangle = 0 \quad (23)$$

这个结果暗示,从这个系统中读不出任何信息.要么这是一个完全非物理的模型;要么它是一个物理的模型,但我们可能忽视了某个重要的原则.

2) $x=0$ 处是一个无限高壁.这一点需要考虑散射态的穿透问题.如果有粒子从左边入射,计算表明,粒子会全部反射回去.这个问题需要麻烦的计

算,有兴趣者可以参考文献[8].不过,一方面,由于束缚能级正好对应于散射振幅度在复波数平面的正虚数上的极点,所以,这一点也可以从无限大基态 $\psi_0 = \sqrt{\delta(x)}$ 的存在看出端倪来.另一方面,也可以从同样看似具有无限大基态 $\psi_0 = \sqrt{\delta(x)}$ 的情况看出问题来.

考虑强度为 γ 的零程吸引势能 $V(x) = -\gamma\delta(x)$, ($\gamma > 0$). 这个系统仅仅存在一个束缚态,能量为 $E = -\mu\gamma^2/(2\hbar^2)$. 当强度 $\gamma \rightarrow \infty$ 时,“束缚态”就是 $\sqrt{\delta(x)}$,即式(10).也就是说,式(10)的存在说明, $-1/|x|$ 的奇异性和 $-\gamma\delta(x)$ 当 $\gamma \rightarrow \infty$ 的奇异性相当.进一步考察此时发生了什么,可以考虑粒子从左边入射.很容易给出透射系数为^[9]

$$T = \frac{1}{1 + \gamma^2 \kappa}, \quad \left(\kappa = \frac{\mu}{2\hbar^2 E} > 0 \right) \quad (24)$$

把这个结果延拓到 $E < 0$ (复 γ) 能域, T 的简单极点对应的束缚态能量正好是 $E = -\mu\gamma^2/(2\hbar^2)$.

很清楚,当强度 $\gamma \rightarrow \infty$,透射系数 $T \rightarrow 0$.这时,空间分割为互不通信息的两个半无限部分^[8].“束缚态”解 $\sqrt{\delta(x)}$ 变得根本就不在问题的框架之内,同样的道理, $-1/|x|$ 在 $x = 0$ 处其实是一个不可穿透壁!这就是空间分割现象^[8].

3) 一个不是很严重的困难是基态解的负无穷能量问题.任何高能级上的粒子会由于自发跃迁而向基态跃迁,如果这样,系统将一直呆在基态上.反过来,如果粒子已经在基态上,似乎就无法跃迁到激发态去.不过,自发跃迁要求有物理真空的存在,而对一维系统如何定义这一真空,且这一真空是否可导致通常的自发跃迁不是很清楚;反过来,如果存在一维真空,而真空中有无限大的能量,这个能量足够把基态上的粒子激发出来.

4) 另外一个不是很严重的困难是,这个问题没有经典对应.在经典力学中,这个问题的解认为粒子只能分别局限在两个半空间中运动,而不能从左半空间运动到右半空间去.为什么这个困难也不是很严重?这是因为,经典力学中不存在的东西,量子力学中可以存在.

4 “标准”结果的数学和物理的困难导致必须正确理解一维氢原子模型

定义在一维全空间 $x \in (-\infty, \infty)$ 中的一维氢原子模型,有许多困难,但是根本的困难在于 $x = 0$ 时,势的奇异性太厉害,以至于把空间分割成为了两个独立的

半无限空间.这样,一维氢原子模型变得异常简单,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{k}{|x|}, \quad x \in [0, \infty) \text{ 或者 } x \in (-\infty, 0] \quad (25)$$

这个系统的能量就是氢原子能级式(15),定态为 $\varphi_n(x)$, ($x > 0$) 或者 $\varphi_n(-x)$, ($x < 0$). 它本质上就是三维氢原子中零角动量的解.

如果考虑到核半径的有限性,一维氢原子模型的势能最好由式(9)来描述,这个时候,奇宇称和偶宇称的解同时存在,但是不简并^[10].关于一维体系的许多量子力学定理都平庸地适用.

5 结论和讨论

尽管形式一样,二维、三维空间中库仑势 $-1/r$ 的奇异性和一维势 $-1/|x|$ 的奇异性完全不同.一维氢原子模型不能定义在全空间 $x \in (-\infty, \infty)$,由于势的奇异性太严重,以至于 $x = 0$ 处,空间被分割成为了两个独立的半无限空间.每个半空间中都有一个一维氢原子.

对于奇异系统,不是一些已知的定理能不能用的问题,而是根本不在同一框架中.这说明在物理学中,每碰到特异性时,往往需要单独研究.

参考文献:

- [1] Flügge S, Marschall H. Rechenmethoden der Quantentheorie [M]. Berlin: Springer-Verlag, 1952: 69.
- [2] Benjamín Jaramilloa, Martínez-y-Romero R P, Núñez-Yépez H N, et al. On the one-dimensional Coulomb problem [J]. Phys Lett A, 2009, 374(2): 150-153.
- [3] Carrillo-Bernal M A, Núñez-Yépez H N, Salas-Brito A L, et al. Comment on “Calculations for the one-dimensional soft Coulomb problem and the hard Coulomb limit” [J]. Phys Rev E, 2015, 91: 027301.
- [4] Daniel H Gebremedhin, Charles A Weatherford. Calculations for the one-dimensional soft Coulomb problem and the hard Coulomb limit [J]. Phys Rev E, 2014, 89: 053319; Reply to “Comment on ‘Calculations for the one-dimensional soft Coulomb problem and the hard Coulomb limit’” [J]. Phys Rev E, 2015, 91: 027302.
- [5] Mineev V S. The Physics of Self-Adjoint Extensions: One-Dimensional Scattering Problem for the Coulomb Potential [J]. Teoret Mat Fiz, 2004, 140(2): 310-328.
- [6] Núñez-Yépez H N, Salas-Brito A L, Didier A Solis. Quantum solution for the one-dimensional Coulomb problem [J]. Phys Rev A, 2011, 83: 064101; Erratum: Quantum solution for the one-dimensional Coulomb problem [Phys. Rev. A 83, 064101

- (2011)] [J].Phys Rev A,2014,89: 049908(E).
- [7] Dai Xianxi, Dai Jixin, Dai Jiqiong. Orthogonality criteria for singular states and the nonexistence of stationary states with even parity for the one-dimensional hydrogen atom [J].Phys Rev A,1997,55: 2617.
- [8] Oseguera U, de Llano M. Two singular potentials: The space-splitting effect [J].J Math Phys,1993,34: 4575.
- [9] 曾谨言.量子力学(卷1)[M].5版.北京:科学出版社,2013:91;240.
- [10] Daniel H Gebremedhin, Charles A Weatherford. Calculations for the one-dimensional soft Coulomb problem and the hard Coulomb limit [J]. Phys Rev E, 2014, 89: 053319.

Space-splitting in the one-dimensional hydrogen atom model

WANG Xin, LIU Tian-gui, LIU Quan-hui

(School for Theoretical Physics, School of Physics and Microelectronic Science, Hunan University, Changsha, Hunan 410082, China)

Abstract: The potential energy for one-dimensional hydrogen atom is usually modelled by $-1/|x|$ over the entire space $x \in (-\infty, \infty)$. Studies over years reach a consensus that the space is separated into two impermeably semi-infinite spaces due to the serious singularity of the potential. In the two spaces, there exist two independent one-dimensional hydrogen atoms.

Key words: one-dimensional hydrogen atom; space-splitting; singular potential

(上接7页)

干重要的量子力学概念.但严格说来,光子的问题不属于量子力学问题,只有在量子场论中才能处理.采用光子的偏振情形来讨论某些量子概念,理论上虽稍欠严谨,但如上文所述,确实能够直观形象地反映量子力学中的若干基本假定,使抽象的量子力学概念落实到对具体实验的分析中来,易于被初学者接受,我们不妨在学生开始学习量子力学时引入此例,有助于学生理解抽象的量子概念,领会量子力学的思维方式.

参考文献:

- [1] 狄拉克.量子力学原理[M].北京:科学出版社,1966.
- [2] 费因曼.费因曼物理学讲义[M].上海:上海科学出版社,2005.
- [3] 曾谨言.量子力学 卷1. [M].北京:科学出版社,2006.
- [4] 赵凯华,罗蔚茵.量子物理[M].北京:高等教育出版社,2001.
- [5] 钱伯初.量子力学[M].北京:高等教育出版社,2006.

Analysis of quantum concept based on optical polarization experiment

LI Jun, XU Shi-cai, WANG Ji-hua

(College of Physics and Electronic Information, Dezhou University, Dezhou, Shandong 253023, China)

Abstract: Quantum mechanics mainly describes the behavior of things at the micro scale. Many quantum phenomena are contrary to daily direct experience, so the basic concept of quantum mechanics is not easy to be understood by students in the course of teaching. Polarized light experiment is a common physical experiment, which is familiar to students, and the experimental phenomenon is intuitive. Focusing on the perspective of observable and measurement, this paper illustrates quantum concepts through the explanation of the phenomenon of optical polarization experiment. In this way, the abstract quantum concepts can be embodied in the analysis of the concrete experimental phenomenon, which will help students understand the basic principles of quantum mechanics.

Key words: quantum mechanics; quantum measurement; polarization