

经典振子和量子振子的对应关系

濮振文 卓光辉

(安徽师范大学)

经典力学和量子力学之间存在着一定的对应关系,在某种极限条件下,量子力学的规律转变为经典力学的规律.对于谐振子而言,这种对应关系更为明显,更有意义.

经典振子的哈密顿量是坐标 q 和动量 p 的函数:

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2. \quad (1)$$

由经典振子的哈密顿方程可得

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad (2)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -m\omega^2 q. \quad (3)$$

从(2)和(3)式可解出

$$\begin{aligned} q(t) &= A \cos \omega t + B \sin \omega t \\ &= q_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} p(t) &= -m\omega A \sin \omega t + m\omega B \cos \omega t \\ &= -m\omega q_0 \sin \omega t + p_0 \cos \omega t. \end{aligned} \quad (5)$$

上两式中 A 和 B 是积分常数,由 $t = 0$ 时的条件确定:

$$\begin{aligned} A &= q(0) = q_0, \\ B &= \frac{p(0)}{m\omega} = \frac{p_0}{m\omega}. \end{aligned}$$

现在引入两个互为复共轭的变量 a 和 a^* , 其定义为

$$a = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} (m\omega q + ip), \quad (6)$$

$$a^* = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} (m\omega q - ip). \quad (7)$$

而

$$q = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} (a^* + a), \quad (8)$$

$$p = i\sqrt{\frac{m\omega}{2}} (a^* - a). \quad (9)$$

于是谐振子的哈密顿函数(1)式可写为

$$H = \omega a^* a. \quad (10)$$

将(8)和(9)式分别代入(2)和(3)式,得

$$\dot{a}^* + \dot{a} = i\omega(a^* - a),$$

$$\dot{a}^* - \dot{a} = i\omega(a^* + a).$$

由上两式得到

$$i\dot{a} = \omega a, \quad (11)$$

$$i\dot{a}^* = -\omega a^*. \quad (12)$$

(11)和(12)式的解可以直接求出:

$$\begin{aligned} a(t) &= a_0 e^{-i\omega t} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} (m\omega q_0 + ip_0) e^{-i\omega t}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} a^*(t) &= a_0^* e^{i\omega t} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} (m\omega q_0 - ip_0) e^{i\omega t}, \end{aligned} \quad (14)$$

上两式中 a_0 和 a_0^* 是 $a(t)$ 和 $a^*(t)$ 在 $t = 0$ 时的值.

对于量子振子,与经典振子哈密顿函数(1)式相应的是哈密顿算符:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{q}^2, \quad (15)$$

式中 \hat{q} 和 \hat{p} 是坐标算符和动量算符,满足如下对易关系:

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (16)$$

(15)和(16)式中的算符是薛定谔绘景中的算符,在薛定谔绘景中,算符与时间无关,波函数与时间有关,波函数随时间的变化满足薛定谔方程;在海森堡绘景中,波函数与时间无关,算符与时间有关.若 \hat{F} 是薛定谔绘景中与时间无关的算符,则在海森堡绘景中 $\hat{F}(t)$ 满足海森堡算符运动方程:

$$\frac{d\hat{F}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}(t), \hat{H}]. \quad (17)$$

但是在这两种绘景中, 哈密顿算符 \hat{H} 和对易关系(16)式有相同的形式^[1], 即

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}(t), \\ [\hat{q}, \hat{p}] &= [\hat{q}(t), \hat{p}(t)] = i\hbar. \end{aligned}$$

若 $\hat{F} = \hat{q}$ 或 \hat{p} , 则由(17)式可得

$$\frac{d\hat{q}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{q}(t), \hat{H}], \quad (18)$$

$$\frac{d\hat{p}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}(t), \hat{H}]. \quad (19)$$

由(15)式并利用对易关系^[2]:

$$[\hat{q}, \hat{F}(q, p)] = i\hbar \frac{\partial \hat{F}}{\partial p}, \quad (20)$$

$$[\hat{p}, \hat{F}(q, p)] = -i\hbar \frac{\partial \hat{F}}{\partial q}, \quad (21)$$

可将(18)和(19)式写为

$$\dot{\hat{q}}(t) = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}} = \frac{1}{m} \hat{p}(t), \quad (22)$$

$$\dot{\hat{p}}(t) = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}} = -m\omega^2 \hat{q}(t). \quad (23)$$

由(22)和(23)式可解出

$$\begin{aligned} \hat{q}(t) &= \hat{A} \cos \omega t + \hat{B} \sin \omega t \\ &= \hat{q} \cos \omega t + \frac{\hat{p}}{m\omega} \sin \omega t, \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \hat{p}(t) &= -m\omega \hat{A} \sin \omega t + m\omega \hat{B} \cos \omega t, \\ &= -m\omega \hat{q} \sin \omega t + \hat{p} \cos \omega t, \end{aligned} \quad (25)$$

上两式中 $\hat{A} = \hat{q}(0) = \hat{q}$,

$$\hat{B} = \frac{\hat{p}(0)}{m\omega} = \frac{\hat{p}}{m\omega},$$

而 \hat{q}, \hat{p} 是薛定谔绘景中坐标算符和动量算符。

现在引入互为共轭的非厄密算符 \hat{a} 和 \hat{a}^+ , 其定义为

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (m\omega\hat{q} + i\hat{p}), \quad (26)$$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (m\omega\hat{q} - i\hat{p}), \quad (27)$$

而

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^+ + \hat{a}), \quad (28)$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a}^+ - \hat{a}). \quad (29)$$

由对易关系(16)式可得 \hat{a}, \hat{a}^+ 的对易关系为

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1, \quad (30)$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^+ \hat{a}] = \hat{a}, \quad (31)$$

$$[\hat{a}^+, \hat{a}^+ \hat{a}] = -\hat{a}^+. \quad (32)$$

于是, 谐振子哈密顿算符(15)式可写为

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}) \\ &= \hbar\omega \left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (33)$$

由(17), (31)和(32)式, 可得

$$\frac{d\hat{a}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{a}(t), \hat{H}] = -i\omega\hat{a}(t),$$

$$\frac{d\hat{a}^+(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{a}^+(t), \hat{H}] = i\omega\hat{a}^+(t).$$

即

$$i\dot{\hat{a}}(t) = \omega\hat{a}(t), \quad (34)$$

$$i\dot{\hat{a}}^+(t) = -\omega\hat{a}^+(t). \quad (35)$$

(34)和(35)式的解可直接求出:

$$\begin{aligned} \hat{a}(t) &= \hat{a} e^{-i\omega t} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (m\omega\hat{q} + i\hat{p}) e^{-i\omega t}, \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} \hat{a}^+(t) &= \hat{a}^+ e^{-i\omega t} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (m\omega\hat{q} - i\hat{p}) e^{i\omega t}. \end{aligned} \quad (37)$$

上两式中 \hat{a}, \hat{a}^+ 是 $t=0$ 时的 $\hat{a}(t), \hat{a}^+(t)$, 亦即 \hat{a}, \hat{a}^+ 是薛定谔绘景中的算符, $\hat{a}(t), \hat{a}^+(t)$ 是海森堡绘景中的算符。比较(2), (3)式与(22), (23)式及(4), (5)式与(24), (25)式, 可见经典振子运动规律与量子振子运动规律的形式相同。引入复共轭变量 a, a^* 和共轭算符 \hat{a}, \hat{a}^+ 后, 经典振子运动方程(11), (12)式及其解(13), (14)式与量子振子算符运动方程(34), (35)式及其解(36), (37)式的形式不仅相同, 而且变为更加对称的形式。当 $\hbar \rightarrow 0$ 时, \hat{q} 和 \hat{p} 对易, \hat{a} 和 \hat{a}^+ 对易, 量子振子的运动规律变为经典振子的运动规律。

在量子力学中, \hat{a} 称为降算符或消灭算符, \hat{a}^+ 称为升算符或产生算符, 而 $\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}$ 称为数

算符或粒子数算符,这是由于 a, a^+, \hat{N} 对谐振子能量本征矢或粒子数本征矢 $|n\rangle$ 作用的结果,有^[3]

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (38)$$

$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad (39)$$

$$\hat{N}|n\rangle = a^+a|n\rangle = n|n\rangle, \quad (40)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}|n\rangle &= \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)|n\rangle \\ &= \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle \\ &= E_n|n\rangle, \end{aligned} \quad (41)$$

式中 n 为量子数或粒子数, $n = 0, 1, 2, \dots$. 若将能量表象基矢 $|n\rangle$ 作为粒子数表象基矢, 则可将单粒子体系量子力学过渡到多粒子体系量子力学, 这就是利用二次量子化方法处理多粒子体系的问题. 谐振子能量本征矢 $|n\rangle$ 的坐标表象是^[4]

$$\begin{aligned} \psi_n(q) &= \langle q|n\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{n! 2^n \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 q^2} H_n(\alpha q), \end{aligned} \quad (42)$$

式中 $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$. 虽然谐振子定态波函数

$$\psi_n(q, t) = \psi_n(q) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

有一个与时间有关的位相因子,但是 $\frac{E_n}{\hbar} t$ 不能描述谐振子位相,因为经典振子的频率与能量无关, $\frac{E_n}{\hbar}$ 并不与经典振子频率相对应,所以谐振子能量本征矢 $|n\rangle$ 或波函数 $\psi_n(q)$ 只能描述与能量有关的状态,不能描述振动位相. 经典振子与量子振子的对应关系还需要考虑到振动位相.

在量子力学中描述与振动位相有关的物理过程需用相干态,而相干态就是消灭算符 a 的本征态. 为了说明这个问题,现将(4)式写为

$$q(t) = A \cos(\omega t + \theta), \quad (43)$$

式中 A 是经典振子的振幅, θ 是初位相. 在量子力学中,与(43)式相应的是算符 $\hat{q}(t)$ 在态矢 $|z\rangle$ 中的平均值:

$$\langle z|\hat{q}(t)|z\rangle = A \cos(\omega t + \theta). \quad (44)$$

这样的态矢 $|z\rangle$ 存在,称为相干态,它是 a 的本征态:

$$a|z\rangle = z|z\rangle. \quad (45)$$

因 a 是非厄密算符,故 $z = |z|e^{i\theta}$ 是复数, θ 是 z 的幅角(位相). 相干态 $|z\rangle$ 与粒子数表象基矢 $|n\rangle$ 的关系是^[5]

$$|z\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (46)$$

由下式定义位相算符 $\hat{\phi}$:

$$\begin{aligned} e^{i\hat{\phi}} &= \frac{a}{\sqrt{\hat{N}+1}}, \\ e^{-i\hat{\phi}} &= \frac{a^+}{\sqrt{\hat{N}+1}}. \end{aligned} \quad (47)$$

可以证明^[6], 当

$$\begin{aligned} \langle z|\hat{N}|z\rangle &= \langle z|a^+a|z\rangle \\ &= z^*z = |z|^2 \gg 1 \end{aligned}$$

时,有

$$\begin{aligned} \langle z|\cos\hat{\phi}|z\rangle &= \cos\theta \left(1 - \frac{1}{8|z|^2} + \dots\right) \doteq \cos\theta, \end{aligned} \quad (48)$$

$$\begin{aligned} \langle z|\sin\hat{\phi}|z\rangle &= \sin\theta \left(1 - \frac{1}{8|z|^2} + \dots\right) \doteq \sin\theta. \end{aligned} \quad (49)$$

上两式表明,在平均粒子数很大的极限条件下,位相算符的相干态平均值与经典位相一致.

由上可见,引入复共轭变量 a, a^* 和共轭算符 a, a^+ , 不仅可使经典振子和量子振子运动方程及其解的形式更为对称,而且利用 a 的本征态——相干态更使经典振子和量子振子之间的对应关系进了一步. 近年来相干态的概念广泛地应用于量子光学、粒子物理学和超导理论等物理学的各个领域,在量子力学中我们还可以利用相干态很方便地计算谐振子的费曼路径积分等^[7].

参 考 文 献

- [1] 曾谨言,量子力学(上册),科学出版社,(1981),172.
- [2] A. Messiah, Quantum Mechanics, Vol. I, North-Holland Publishing Company, (1972), 208
- [3] ibid, 436, 437.
- [4] ibid, 440.

(下转第 583 页)

象 玻 璃 的 晶 体

对了解晶体的结构和性质很有效的一些理论和实验方法,大多不能用于说明玻璃态的结构和性质。玻璃态的微观结构至今仍有争议;一些基本问题如为什么玻璃态是固体(或甚至玻璃是固体吗?),物理学家还回答不清楚。因此,如果能找到一些晶态系统,其结构是清楚的,但又具有玻璃态特有的许多性质,对于检验我们为解释玻璃态行为所提出的模型是很有价值的。

玻璃在无序方面类似于液体,但它坚硬,故又类似于晶体。在晶体中,每个原子有确定的位置,而玻璃每次形成时原子排列的位形都完全不同。有时原子或局部的一组原子会有两个能量低的排列位形(两能级系统),并能在两者之间转换。有些原子可以转换得比其他原子快得多,这导致弛豫时间有宽分布,也会造成在外力作用下,玻璃在长时间内逐渐地弯曲。具有玻璃结构的材料常表现出共同的低温性质^[1](如在低温下,比热正比于温度 T ,热导正比于 T^2 ,而绝缘晶体则不同,比热和热导均正比于 T^3),其原因也在于这种“两能级系统”。这种看法和材料的具体结构无关,自然可用于所有的玻璃。然而,两能级系统的微观结构位形仍然是个谜,这使人们对低频弛豫的了解进展缓慢。

混合晶体 $(\text{KBr})_{1-x}(\text{KCN})_x$ 具有很多和玻璃相同的性质,但和玻璃不同的是,人们对它的结构有很清楚的了解。当氰化物的相对浓度 x 在 0.1 和 0.6 之间时,晶体冻成无序的“取向玻璃”态,这个态的弛豫时间分布很宽^[2]并且具有玻璃态共同的全部低温性质^[3]。样品是具有氯化钠结构的立方晶体,橄榄球状的氰化物离子 (CN^-) 无规则地置换了晶格中的溴。氰化物-氰化物之间强的弹性力使其长轴冻结到一确定

位置,但每个位置有两个低能态,相当于离子旋转 180° ,即碳和氮相互交换。由于每个氰化物有不同的近邻,阻止其发生 180° 旋转的位垒高度有一个分布,使某些氰化物比其它的氰化物更容易反转一些。介电损耗测量亦表明弛豫时间有一宽分布^[2],这来源于氰化物离子克服位垒的无规热旋转^[4]。比热与时间有关(玻璃态材料低温下的共性之一)来源于这些离子通过上述位垒的量子隧道效应^[5]。

总之,在 $(\text{KBr})_{1-x}(\text{KCN})_x$ 中,取向差 180° 的氰化物离子形成“二能级系统”这种模型对其低频和低温的玻璃态行为提供了统一的解释。我们确实还没有玻璃态的普遍理论,但是对一特殊的具有氯化钠结构的材料所表现出来的玻璃态行为我们了解得更清楚了。我们希望并期待着对玻璃晶态系统的进一步研究,这将有助于解决有关玻璃态的一些不清楚的问题。

(童莉泰译自 *Physics Today*, 1986 年第 1 期)

参 考 文 献

- [1] R. C. Zeller and R. O. Pohl, *Phys. Rev.*, **B 4** (1971), 2029; P. W. Anderson et al., *Philos. Mag.*, **25**(1972), 1; W. A. Phillips, *J. Low Temp. Phys.*, **7**(1972), 351.
- [2] F. Luty and J. Ortiz-Lopez, *Phys. Rev. Lett.*, **50** (1983), 1289; N. O. Birge et al., *Phys. Rev.*, **B 30**(1984), 2306.
- [3] J. J. De Yoreo et al., *Phys. Rev. Lett.*, **51**(1983); 1051; D. Moy et al., *Phys. Rev.* **B29**(1984), 2160.
- [4] J. P. Sethna et al., *Phys. Rev. Lett.*, **53** (1984), 2489; I. Kanter et al., to be published.
- [5] M. Meissner et al., to be published.
- [6] R. Loudon, *The Quantum Theory of Light*, Oxford University Press, (1973), 149.
- [7] Fan Hong-Yi (范洪义), Ruan Tu-nan (阮图南), *Commun. Theor. Phys.* (Beijing, China), **3-4** (1984), 444.

(上接第581页)