

一维定态薛定谔方程的宏观模拟解法

刘剑波 蔡喜平

(哈尔滨工业大学应用物理系, 哈尔滨 150001)

(2000 年 11 月 17 日收到)

将实验模拟法引入量子力学, 设计了一个弦振动系统, 这个系统的定态方程与定态薛定谔方程数学形式一样, 为定态薛定谔方程的模拟解法提供了理论和实验途径. 宏观模拟的结果为理解薛定谔方程提供了宏观类比.

关键词: 薛定谔方程, 宏观模拟解法

PACC: 0365

1 引 言

在量子力学的局域性理论中, 薛定谔方程具有核心地位. 目前解这个方程有三种方法. 一是在数学上严格求解, 得到体系的能量本征值与本征波函数(如著名的氢原子问题); 二是近似计算方法(如微扰法、变分法、WKB 法等); 三是数值算法, 由于计算机的应用, 目前有大量文献报道这种方法的使用^[1-3]. 本文将研究另外一种方法, 即将微分方程的实验模拟法引入量子力学, 建立一个宏观波动体系, 这个体系所服从的波动方程在数学形式上与薛定谔方程一样, 那么, 我们就可以用实验的方法研究这个宏观体系在各种边界条件下所表现出的现象, 这些宏观现象在数学上对量子体系的行为. 这样就通过研究宏观现象巧妙地研究了微观现象. 这样做有三点好处: 一是使难以理解的量子现象有了一个宏观类比; 二是宏观实验可以模拟任意形状的定态势场约束下德布罗意波的行为, 这是严格求解法和近似算法做不到的; 三是通过宏观模拟可以洞察一些至今没有发现的量子现象. 对于定态的薛定谔方程, 本文介绍的工作达到了上述目的.

2 非齐次弦振动方程

设一柔软的细线, 线密度 ρ 、张力为 T , 处在一种弹性媒质中, 媒质对弦线仅提供形式为 $F = -K(x) \cdot U(x) \cdot \Delta x$ 的力. $U(x)$ 是弦线上任一点离开平衡位置的位移, $K(x)$ 是 x 点的弹性系数, Δx 是所研究弦线上的一小段在 x 轴上的投影, 负号代表

F 方向与 $U(x)$ 方向相反(图 1 所示). 下面用标准的力学位程序证明, 这个体系的运动规律符合 Klein-Gordon 方程.

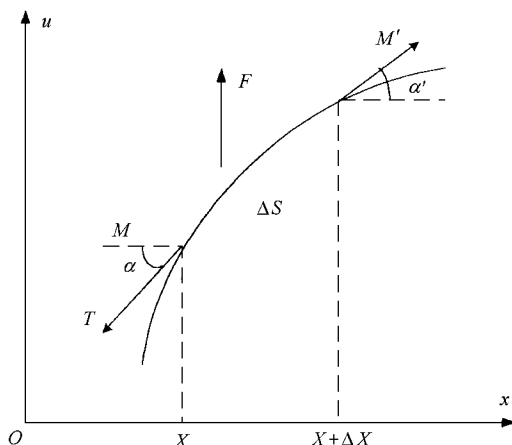


图 1 非齐次弦振动方程的推导

在弦上任取一小段 MM' . 由于弦的振动是微小的, 故可以认为弦在振动过程中并未伸长, 即可以认为 MM' 的弧长 $\Delta s = \Delta x$, 这时张力 T 是一个常数, 它与位置 x 和时间 t 均无关. 又由于弦是柔软的, 所以张力 T 的方向总是沿着弦的切线方向^[4].

受力分析:

(1) 作用在 M' 点上的张力 T , 它在 u 轴方向的分力为 $T \sin \alpha'$.

(2) 作用在 M 点的张力 T , 它在 u 轴方向的分力为 $-T \sin \alpha$.

(3) 作用在 MM' 上, 垂直于 x 轴约束力为 $F = -K(x) \cdot \Delta x \cdot \Delta u(x)$, 其中 $K(x)$ 是作用于弦线上质量元 $\Delta x \cdot \rho$ 的弹性约束力 F 的线密度, ρ 是弦的质

量密度.

根据牛顿第二定律

$$T \sin \alpha' - T \sin \alpha - K(x) \cdot u \cdot \Delta x = \rho \cdot \Delta x \cdot u_{tt}. \quad (1)$$

$$\text{因 } \operatorname{tg} \alpha = u_x, \text{ 故 } \sin \alpha = \frac{\operatorname{tg} \alpha}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \alpha}} = \frac{u_x}{\sqrt{1 + u_x^2}}.$$

由于弦作微小振动,形变很小, $u_x^2 \ll 1$, 故

$$\sin \alpha \approx u_x(x, t). \quad (2)$$

同理

$$\sin \alpha' \approx u_x(x + \Delta x, t). \quad (3)$$

(2)(3)式代入(1)式得

$$T[u_x(x + \Delta x, t) - u_x(x, t)] - K(x) \cdot u \cdot \Delta x = \rho \cdot \Delta x \cdot u_{tt}.$$

应用中值定理:

$$[u_x(x + \Delta x, t) - u_x(x, t)] = u_{xx} \cdot \Delta x,$$

得

$$T u_{xx} \cdot \Delta x - K(x) \cdot u \cdot \Delta x = \rho \cdot \Delta x \cdot u_{tt}.$$

式中, u_{xx} 是 u 对空间变量 x 的二阶偏导数, u_{tt} 是 u 对时间变量 t 的二阶偏导数.

令 $\Delta x \rightarrow 0$, 上式化为

$$u_{tt} = \frac{T}{\rho} u_{xx} - \frac{K(x)}{\rho} \cdot u.$$

记 $\frac{T}{\rho} = a^2$, $-\frac{K(x)}{\rho} = f$, 上式写成

$$u_{tt} = a^2 u_{xx} + f \cdot u. \quad (4)$$

这就是所设系统的运动方程.与相对论性量子论的 Klein-Gordon 方程数学形成上完全一样,比一维含时薛定谔方程(5)在时间变量上多一次偏导.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + V(x) \Psi. \quad (5)$$

重要的是力函数 $f = -\frac{K(x)}{\rho}$ 在方程(4)中的作用与薛定谔方程中的势函数 $V(x)$ 完全一样,正是这一点,保证了我们能够模拟一维定态薛定谔方程.

下面将证明这一点.

3 定态非齐次弦振动方程与一维定态薛定谔方程的对应

虽然方程(4)对时间是二阶偏导,与薛定谔方程(5)对时间一阶偏导不一致,但下面可以证明,不含时的定态方程(4)与一维定态薛定谔方程数学形式完全一致.由于研究的是(4)式的定态形式即驻波解,力函数 $f(x)$ 仅与空间有关,所以可以考虑方程

(4)的分离变量形成的驻波解.

将(6)式代入(4)式,两边同除 $a^2 XY$ 得

$$\frac{1}{a^2 Y} \cdot \frac{d^2 Y}{dt^2} = \frac{1}{X} \cdot \frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{f}{a^2}. \quad (7)$$

方程(7)左边只与时间有关,右边只与空间坐标有关,两边相等,必然是左右两边共同等于一个常数.设这个常数为 $-c$, 则(7)式分离为如下两个方程.

描写时间行为的左式:

$$Y''(t) + ca^2 Y = 0. \quad (8)$$

描写空间行为的右式:

$$X''(x) + \frac{f}{a^2} X = -cX.$$

将 $f = -\frac{K(x)}{\rho}$, $a^2 = \frac{T}{\rho}$ 代入上式得

$$X'' - \frac{K(x)}{\rho} X = -cX. \quad (9)$$

方程(9)就是图1所设系统的定态方程.为了方便与一维定态薛定谔方程的比较,将(5)式写成

$$\Psi'' - \frac{2m}{\hbar^2} V(x) \cdot \Psi = -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot E \Psi. \quad (10)$$

现在比较(9)(10)式,很显然(9)(10)两式左边第一项都是关于空间的二阶导,第二项函数都乘以一个只与 x 有关的变系数,右侧的函数都乘以一个常数,所以有如下的模拟关系:

$$\Psi \rightarrow X, \quad (11)$$

$$-\frac{2m}{\hbar^2} V(x) \rightarrow -\frac{K(x)}{T}, \quad (12)$$

$$-\frac{2m}{\hbar^2} E \rightarrow -c. \quad (13)$$

可见,定态的薛定谔方程(10)与定态的齐次弦振动方程(9)在数学形式上完全一样,可以利用(9)式在宏观上的行为模拟薛定谔方程的微观量子行为.

4 模拟关系的进一步明确

1. 模拟关系(11)式,意义很明确:弦振幅沿 x 方向的分布形状就对应概率波的本征波函数的具体形状.

2. 将(9)(10)式都框定在一维无限深势阱中运动,即令 $V(x) \rightarrow \infty$, $\frac{K(x)}{T} \rightarrow \infty$, 则薛定谔方程形成分立的能级:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL_{物}^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (14)$$

m 为电子质量、 $L_{物}$ 为势垒宽度。

弦振动方程将形成驻波：

$$c = \frac{\pi^2 n^2}{L_{弦}^2}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (15)$$

在 (14) 式中令 $n = 2$, 即在势阱中形成一个电子的德布罗意波(波长 $\lambda_{物}$) 即 $L_{物} = \lambda_{物}$ (14) 式化为

$$E_2 = \frac{\pi^2 \hbar^2 \cdot 2^2}{2m\lambda_{物}^2}. \quad (16)$$

在 (15) 式中令 $n = 2$, 即在弦的势阱中形成一个驻波(波长 $\lambda_{弦}$) (15) 式化为

$$c_2 = \frac{\pi^2 \cdot 2^2}{\lambda_{弦}^2}. \quad (17)$$

(16) (17) 式代入对应关系 (13) 式, 并整理得

$$\lambda_{物} \rightarrow \lambda_{弦}. \quad (18)$$

很明显, 对 $n = 1, 2, 3, \dots$ 都会得到 (18) 式. 这样通过势阱中两方程的行为, 得到了非常齐整的 (18) 式. 更普遍地, 可以证明两方程在势场内部的行为也将导出相同的对应关系.

3. 讨论模拟关系 (12) 式的意义. 对于确定的弦振动系统, 线密度 ρ 、张力 T , 一般都是固定的, 所以在实际的模拟实验中, 一旦调整合适后, ρ, T 可视作常数. 这样 (12) 式中变动的量就是 $V(x)$ 和 $K(x)$. 所以 (12) 式化为

$$V(x) \rightarrow K(x). \quad (19)$$

4. 讨论时间方程 (8) 导致的模拟关系. 在定态的情形中, 时间部分和空间部分是分离的, 但又有一定的确定关系. 在势场内部薛定谔方程的时间分量方程为

$$i\hbar \frac{df}{dt} = Ef.$$

通解为 $f(x) = D \cdot e^{-\frac{iE}{\hbar} \cdot t}$, E 是定态能量,

$$E = \hbar w_{物}. \quad (20)$$

相应地, 在弹性势场内部, 定态非齐次弦振动方程的时间方程 (8) 的通解为

$$Y(t) = A \cdot \cos\sqrt{c} \cdot at + B \sin\sqrt{c} \cdot at.$$

即此弦振动的圆频率为

$$w_{弦} = \sqrt{c} \cdot a,$$

写成

$$c = \frac{1}{a^2} \cdot w_{弦}^2. \quad (21)$$

将 (20) (21) 式代入模拟关系 (13) 式, 并略掉系数得

$$w_{物} \rightarrow w_{弦}^2.$$

总结以上讨论, 得到如下明确的模拟关系, 这种模拟关系在后面的模拟实验中变得更加具体、生动.

$$\begin{aligned} \Psi &\rightarrow X, \\ V(x) &\rightarrow K(x), \\ \lambda_{物} &\rightarrow \lambda_{弦}, \\ w_{物} &\rightarrow w_{弦}^2. \end{aligned} \quad (22)$$

5 简单的实验模拟和讨论

理论上已经明确, 图 1 所示的弦振动装置中, 弹性体的弹性系数 $K(x)$ 就相当于薛定谔方程中的势场 $V(x)$. 这说明, $K(x)$ 对弦线的弹性约束对应薛定谔方程的 $V(x)$ 对 Ψ 的约束. 这确实是幸运的事, 使我们可以利用极简单的装置就可以模拟定态薛定谔方程的深刻内涵. 这里只能粗略介绍模拟一维线性谐振子的结果, 详细的应用范例另文发表.

量子力学的一维谐振子形成分立的能级 $E_n = \hbar w \left(n + \frac{1}{2} \right)$. 这完全是由于势函数 $V(x)$ 的空间形状对自由电子波的约束造成的. 用一个电磁铁激励的振子作为激励源, 激励一段张紧的弦线, 将几条弹性极好的橡胶丝固结在弦线上, 将橡胶丝的自由端 A 和 A' 固定(图 2(a)). 容易证明一个均匀的橡胶丝, 长度越长, 相应的 K 值就越小, 正是利用这一点, 可以随意控制 K 的取值, 用它来模拟不同形状的势函数 $V(x)$. 在模拟谐振子的实验中布置 $K(x)$ 在 x 轴方向的分布呈 $K(x) = \frac{1}{2} cx^2$ 形. 调节激励源频率, 在 98Hz, 174Hz, 226Hz, 261Hz 4 个频率处出现了明显的驻波. 相应地, 在弦上出现了 4 种驻波波形, 如图 2(b) 所示. 由于空气阻尼的作用, 其他高频的共振驻波几乎出现不了. 可以预料, 如果将这个装置放于真空中, 更高次的驻波一定可以观察到. 实验中, 其他参数的数据为: $T = 4N$, $\rho = 1.7 \times 10^{-4} \text{ kg/m}$, $K_A = 3N/m$, $K_B = 0.4N/m$, 橡胶丝间距 $d = 0.04 \text{ m}$, 橡胶丝线密度 $\rho' = 1 \times 10^{-4} \text{ kg/m}$.

利用模拟关系 (22), 对所得数据进行处理如表 1. 可以看出表 1 最后一列数据就体现了线性谐振子的能级结构, 可以归纳, 在 5% 的误差内, 对于 $n = 0, 1, 2, 3$ 存在关系 $E_n = \hbar w_{物} \left(n + \frac{1}{2} \right)$. 这正是一维线性谐振子的本征能量的严格解析解. 对于实验中出现的 4 个驻波波形, 可以很容易看出, 它们分别对应于 $n = 0, 1, 2, 3$ 的 4 个本征波函数.

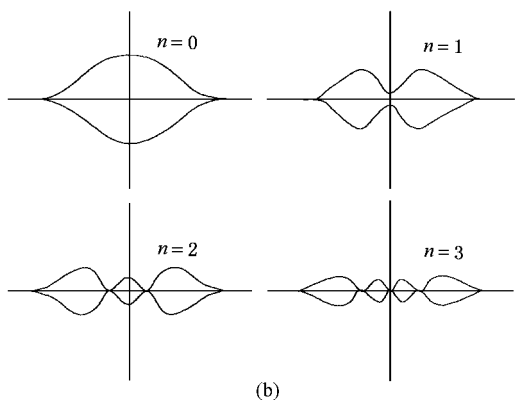
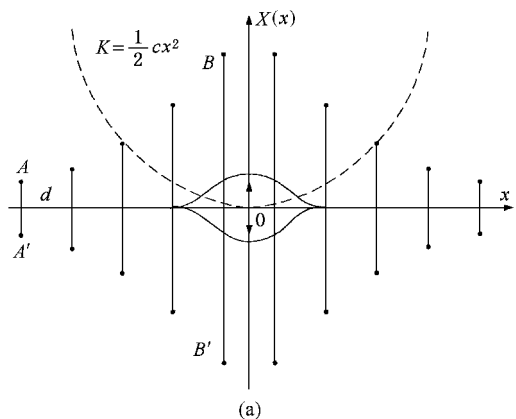


图 2 一维线性谐振子的模拟 (a)虚线代表 $K(x)$ 势场”的形状,圆点代表橡胶丝的固定端,激励源在 o 点激励这个弦振动系统.(b)实验中观察到的 4 个共振驻波波形,它们对应 $n = 0, 1, 2, 3$ 的本征波函数

表 1 数据处理及结果

$w_{\text{弦}}/\text{Hz}$	$w_{\text{弦}}^2(\text{Hz}^2)$	取 9604 (Hz) ² 的 2 倍为 1 个 $w_{\text{弦}}^2$ 单位	$w_{\text{物}}$	$E = \frac{1}{h}w_{\text{弦}}$
98	9604	1/2	1/2	$(0 + 1/2) \hbar w_{\text{物}}$
173	29929	1.56	$1.06 + 1/2$	$(1.06 + 1/2) \hbar w_{\text{物}}$
226	51076	2.66	$2.06 + 1/2$	$(2.06 + 1/2) \hbar w_{\text{物}}$
261	68121	3.55	$3.05 + 1/2$	$(3.05 + 1/2) \hbar w_{\text{物}}$

以上,大致给出了应用模拟法解定态薛定谔方程的简单步骤.由于是模拟解法,结果只能给出所研究系统的能级结构和本征波函数的形状.显然要想了解所研究系统的具体数值,需要知道一个能量本征值和相应的波函数作为定标初始值,这也是其他近似法和数值算法都具有的缺点^[4].

6 结 论

1. 找到了一个宏观系统,它的行为遵从 Klein-Gordon 方程,它的定态方程就是 $\hat{H}\Psi = E\Psi$. 这为研究量子力学提供了一种新方法——实验模拟法.

2. 定态薛定谔方程的宏观模拟,为理解量子力学的结论提供了宏观对比物.

[1] J. L. Krause, K. J. Schafer, K. C. Kulander, *Phys. Rev. Lett.*, **68** (1992) 3535.
 [2] Ke-zhu Yan et al., *Acta Physica Sinica* **48**(1999), 1185 (in Chinese) [闫珂柱、谭维翰, *物理学报*, **48**(1999), 1185].
 [3] K. Burnett, P. L. Knight, B. R. M. Piraux et al., *Phys. Rev. Lett.*,

66(1991) 301.
 [4] K. M. Liang, *Partial Differential Equation* (High Education Press, Beijing, 1995), 150 (in Chinese) [梁昆森, *数学物理方法*, 第二版 (高等教育出版社, 北京, 1995), 150].

A MACROSCOPICAL SIMULATION SOLUTION TO THE ONE-DIMENSIONAL STATIONARY STATE SCHRÖDINGER EQUATION

LIU JIAN-BO CAI XI-PING

(*Departmental of Applied Physics , Harbin Institute of Technology , Harbin 150001 , China*)

(Received 17 November 2000)

ABSTRACT

The experimental simulation method is introduced into the quantum mechanics. A vibrating chord system with a stationary stote equation in a form similar to that of the stationary Schrödinger equation is designed. The system offers the theoretical and experimental methods for the simulation solution to the stationary Schrödinger equation. The results of the macroscopical simulation presents a macroscopical analogy for the understanding of the Schrödinger equation.

Keywords : Schrödinger equation , macroscopical simulation solution

PACC : 0365