第 50 卷 第 8 期 2001 年 8 月
1000-3290/2001/50(06)/1425-04

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.50,No.8,August,2001

希尔伯特空间中的概率流和概率守恒

邓文基

(华南理工大学物理系,广州 510641)

(2001 年 2 月 19 日收到)

实空间中的概率流概念和概率守恒定理被推广到希尔伯特(Hilbert)状态空间,从而得到了概率流算符的通式.应用一般形式的概率流算符公式,还导出了紧束缚模型中单电子和互作用多电子系统的概率流算符,并以异常简单的方式证明了反射-透射流归一化条件.

关键词:希尔伯特空间, 概率流算符, 紧束缚模型

PACC:0365, 7210

1 引 言

实空间中的概率流概念和概率守恒定理是任何量子力学课程都要讲述的内容[1,2].在以往的研究中我们发现若将有关概念和定理推广到一般的希尔伯特(Hilbert)状态空间,不仅有利于揭示许多不同物理现象的共同本质,而且还能提供处理某些问题的有效数学工具.

在第二节中,我们将推导出希尔伯特空间中的概率流算符的一般形式.由此可以计算在任意量子态下,系统发生量子迁移的概率流.在第三节中,我们证明了常用的实空间概率流密度矢量也可以按希尔伯特状态空间概率流算符重新得到.在第四节中,我们不仅得到了单电子紧束缚模型的概率流算符,而且还以一种异常简单的方式证明了有关的入射-出射流归一化条件.第五节将有关讨论推广到考虑互作用的多体系统.我们证明了由普遍形式的概率流算符推导多电子系统的电流算符具有物理图象清楚运算简单的优点.最后,第六节是简短的讨论和总结.

2 希尔伯特空间中的概率流

在量子力学中,由单粒子薛定谔(Schrödinger)方程出发可直接导出一个守恒定理[1]

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*).\quad(1)$$

该等式普遍成立,不依赖于势能函数的具体形式.根据波函数的统计解释,归一化的波函数给出概率密度 $\rho(\boldsymbol{r},t)=\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$.所以,概率流密度矢量定义为

$$\boldsymbol{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi).\quad(2)$$

方程(1)即为定域的概率守恒定理

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{j} = 0.\quad(3)$$

为使以下的讨论更具普遍性,我们采用狄拉克(Dirac)抽象的右矢(ket)和左矢(bra)记号.薛定谔方程一般地写作

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle.\quad(4)$$

或

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi| = \langle\psi|\hat{H},\quad(4')$$

其中算符 $\hat{H}$ 是系统的哈密顿量(Hamiltonian).如果希尔伯特空间的一组正交归一完备基记为 $\{|n\rangle\}$,不难得到量子跃迁过程的主方程

$$\frac{\partial P_m}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\langle\psi|\sum_n(H_{mn}|m\rangle\langle n| - H_{nm}|n\rangle\langle m|)|\psi\rangle,\quad(5)$$

其中 $P_m\equiv\langle\psi|m\rangle\langle m|\psi\rangle$ 表示处于量子叠加态 $|\psi\rangle$ 的系统被发现处于本征态 $|m\rangle$ 的概率.所以,在希尔伯特空间从任意本征态 $|n\rangle$ 流向 $|m\rangle$ 的概率流算符应该定义为

$$\hat{\boldsymbol{J}}_{n\to m} = \frac{H_{mn}}{i\hbar}|m\rangle\langle n|,\quad(6)$$

从而流出本征态 $|m\rangle$ 的概率流算符为 $\hat{\boldsymbol{J}}_m =$

$\sum_n(\hat{J}_{m\to n}-\hat{J}_{n\to m})$，概率守恒定理方程(3) 可改写为

$$\frac{\partial P_m}{\partial t}+\langle\psi|\hat{J}_m|\psi\rangle=0. \tag{3'}$$

在任意量子态下流出本征态$|m\rangle$的概率流的期望值可最普遍地写作

$$\boldsymbol{J}_m=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{n\neq m}\Big[H_{mn}\langle\psi|m\rangle\langle n|\psi\rangle - H_{nm}\langle\psi|n\rangle\langle m|\psi\rangle\Big]. \tag{7}$$

3 实空间的概率流密度公式

实空间是希尔伯特空间的一个特例.此时正交归一完备基可选为 $\{|x\rangle\}$;作为连续变量的空间坐标它要求的正交"归一"关系为

$$\langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}'\rangle=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'). \tag{8}$$

按方程(7),在 x 点处的净概率流为

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\iiint\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\,[H_{xx'}\langle\psi|\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}'|\psi\rangle - H_{x'x}\langle\psi|\boldsymbol{x}'\rangle\langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle]. \tag{9}$$

注意到 $\psi(\boldsymbol{x})=\langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle$，$H_{xx'}=\langle\boldsymbol{x}|\hat{H}|\boldsymbol{x}'\rangle$，一个质量为 m、电荷为 q 的粒子在电磁场中运动时的哈密顿量为

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{A})^2+q\phi, \tag{10}$$

其中 $\boldsymbol{A}$ 和 ϕ 分别为电磁场的矢势和标势，$\hat{p}$ 是动量算符.因此，哈密顿量的非对角矩阵元将写为

$$H_{x'x}=\Big[\frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\hbar\nabla-q\boldsymbol{A})^2+q\phi\Big]\delta(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}). \tag{11}$$

因为$\langle x'|\hat{p}|x''\rangle=-\mathrm{i}\hbar\partial\delta(x'-x'')/\partial(x'-x'')$，上式等号右端方括号中的微分运算必须被理解为以 $\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}$ 为变量[3].简单的运算可以将(9)式化为

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})=\frac{\mathrm{i}}{2m\hbar}\iiint\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\,[\psi(\boldsymbol{x}')\psi^*(\boldsymbol{x})-\psi^*(\boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x})]\cdot(-\mathrm{i}\hbar\nabla-q\boldsymbol{A})^2\delta(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}). \tag{12}$$

若电磁场的矢势取库仑(Coulomb)规范$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$，上式可进一步整理为 $J(\boldsymbol{x})=\nabla\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x})$，其中

$$\boldsymbol{j}=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi)-\frac{q}{m}\psi^*\boldsymbol{A}\psi, \tag{13}$$

它正是人们熟知的概率流密度矢量[1,2].

4 紧束缚模型中的概率流

紧束缚模型是固体物理学中经常采用的标准模型[4,5].在几乎所有关于固体量子特性的研究中，它都得到了成功的运用.在本节中，我们首先讨论单电子输运的普遍问题.

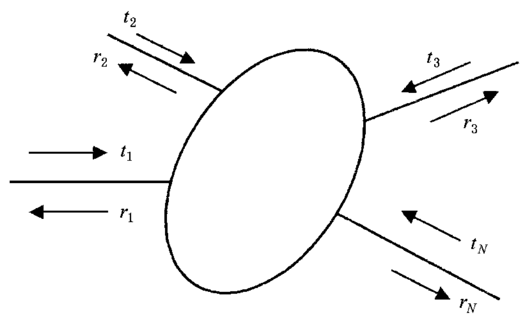

图 1 多端输入-输出系统示意图

概率幅为 1 的入射平面波被散射后，将产生概率幅分别为 r 和 t 的反射和透射平面波.由实空间的概率守恒定理(1)经简单计算可以得到

$$|t|^2+|r|^2=1. \tag{14}$$

我们发现在紧束缚模型中类似的反射-透射流归一化条件也可以按希尔伯特空间中的概率流公式(7)来证明.

考虑一个导电系统如图 1 所示，它由 N 根直导线(leads)分别外接电源.在紧束缚近似下，该系统的单电子哈密顿量为

$$\hat{H}=\sum_n\Big(\varepsilon_n|n\rangle\langle n|+\sum_\delta h_{n,n+\delta}|n\rangle\langle n+\delta|\Big), \tag{15}$$

其中 ε_n 和 $h_{n,n+\delta}$ 分别标记座能量(site-energy)和跃迁矩阵元(hopping elements)，对 n 的求和包含所有的格点，也就是整个的正交归一完备基 $\{|n\rangle\}$;而对 δ 的求和只涉及最紧邻的格点.此时，由方程(7)所定义的概率流可约化为

$$\boldsymbol{J}_m=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_\delta(h_{m,m+\delta}\varphi_m^*\varphi_{m+\delta}-h_{m+\delta m}\varphi_{m+\delta}^*\varphi_m), \tag{16}$$

其中 $\varphi_m\equiv\langle m|\psi\rangle$是格点 m 上的波函数.在稳态的情形下，任意格点上的净概率流必为零.我们选择导电体上的所有格点，包括与引线(leads)的连接点 O_l $(l=1,2,\cdots,N)$求和给出的净概率流也必为零，即

$$\sum_{l=1}^N h_l(\varphi_{O_l}^*\varphi_{O_l-1}-\varphi_{O_l-1}^*\varphi_{O_l})=0. \tag{17}$$

在引线 l 中,跃迁矩阵元恒为 h_l .如果从连接点 O_l 开始,格点编号为 $n=0,-1,-2,\cdots$,则引线中的波函数总可以写作

$$\varphi_n = t_l e^{ink_l} + r_l e^{-ink_l}. \tag{18}$$

它是入射波(t_l)和出射波(r_l)的叠加,其中波矢 k_l 由色散关系 $E=\varepsilon_l-2h_l\cos k_l$ 确定.将(12)式代入(11)式,经简单计算可得到

$$\sum_{l=1}^{N}\left(|r_l|^2-|t_l|^2\right)h_l\sin k_l = 0. \tag{19}$$

如果所有的引线都相同,上式成为

$$\sum_{l=1}^{N}|r_l|^2=\sum_{l=1}^{N}|t_l|^2. \tag{20}$$

在关于一维紧束缚模型的研究中,通常只有两根引线.假定入射波的概率幅为单位 1,即 $t_1=1$;反射波和透射波的概率幅分别为 r 和 t,即 $r_1=r, t_2=0, r_2=t$,则重新得到紧束缚模型中的反射-透射流归一化条件方程(8).

5 多体系统的概率流公式

在紧束缚近似下,多电子系统二次量子化的哈密顿量可一般地写作[5]

$$\hat{H} = \sum_{l,\sigma}\varepsilon_{l\sigma}\hat{n}_{l\sigma} + \sum_{\substack{l,l'\\ \sigma,\sigma'}}U_{ll'}\hat{n}_{l\sigma}\hat{n}_{l'\sigma'} + \sum_{l,\delta,\sigma}h_{l,l+\delta}\hat{a}^{+}_{l+\delta,\sigma}\hat{a}_{l,\sigma}, \tag{21}$$

其中等号右端前两项分别是格点上的座能量和电子的库仑互作用能,第三项描述电子在不同格点之间的量子跃迁.由第二节的公式(6)和(7)容易证明,前两项将不出现在概率流的计算中,即格点的座能量和电子的库仑互作用能只能通过改变波函数来间接地影响电流.如果规定沿格点标号增加的方向为概率流的正方向,则相邻格点 l 和 $l+1$ 之间的净概率流算符 $\hat{j}_{l+}\equiv\hat{j}_{l\to l+1}-\hat{j}_{l+1\to l}$ 可整理为

$$\hat{j}_{l+} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{\sigma}\left(h_{l,l+1}\hat{a}^{+}_{l+1,\sigma}\hat{a}_{l,\sigma} - h_{l+1,l}\hat{a}^{+}_{l,\sigma}\hat{a}_{l+1,\sigma}\right). \tag{22}$$

因为在粒子数表象中,(21)式所定义的哈密顿量的非对角矩阵元几乎都为零,除非只需要将一个电子由某格点移动到最近邻的格点就可以互相转换有关的两个本征态.

在稳定状态下,任意格点上的平均粒子数保持不变.这就要求流出流进这一格点的概率流相等,即

$$\boldsymbol{j}_{l\to l+1}-\boldsymbol{j}_{l+1\to l}=\boldsymbol{j}_{l-1\to l}-\boldsymbol{j}_{l\to l-l}. \tag{23}$$

所以,为计算某格点处的电流,也可以求所有格点的电流之和 ;从而将系统的流算符定义为

$$\hat{J} = \sum_{l}\hat{j}_{l+}, \tag{24}$$

将(22)式代入,可得到

$$\hat{J} = -\frac{i}{\hbar}\sum_{l\sigma\delta}\delta h_{l,l+\delta}\hat{a}^{+}_{l+\delta}\hat{a}_{l}, \tag{25}$$

其中相对位移 $\delta=+1$ 或 -1.在文献[5]的 30 和 31 页,作者是从系统的极化矢量算符的运动方程出发推导出类似(25)式的流算符的.

6 结 语

本文报道了关于希尔伯特空间中的概率流和概率守恒的部分研究结果.通过一些典型的例子,说明了普遍形式的概率流算符公式是怎样有益于揭示不同物理现象的共同本质的.特别地,运用希尔伯特空间概率流算符公式可以异常简便地证明紧束缚模型中电子输运的概率流归一化条件.

[1] J. Y. Zeng, Quantum Mechanics, Vol. **1** (3^{rd} ed.) (Science Press, Beijing, 2000) (in Chinese) [曾谨言,量子力学(卷Ⅰ)(第三版)(科学出版社,北京,2000)].

[2] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics (Non-Relativistic Theory) (3^{rd} ed.) (Pergamon Press Ltd. 1977).

[3] See p. 232 and 233 of Ref. [1], and Relize That the δ Function is Defined in Suitable Integral [见文献[1]的第 232 和 233 页.特别要注意 δ 函数只在适当的积分运算中才有意义].

[4] Z. Z. Li, Solid State Theory (Advanced Education Press, Beijing, 1985) (in Chinese) [李正中,固体理论(高等教育出版社,北京,1985)].

[5] G. D. Mahan, Many-Particle Physics (2^{nd} ed.) (Pleum Press, New York, 1990).

PROBABILITY CURRENTS AND CONSERVATION OF PROBABILITY IN HILBERT SPACE

DENG WEN-JI
(*Department of Physics*, *South China University of Technology*, *Guangzhou* 510641, *China*)

(Received 19 February 2001)

ABSTRACT

The general formula of probability current operator is obtained by generalizing the concept of probability current and the theorem of probability conservation. With the help of this new formula, we derive a probability current operator for the tight-binding models of single electron system and interacting-multi-electron system, and then prove, in a very simple way, the normalization condition of reflection-transmission currents.

Keywords: Hilbert space, probability current operator, tight-binding model
PACC: 0365, 7210

更 正

物理学报 2001 年 4 月第 50 卷第 4 期第 626 页,"耦合映象格子中时空混沌的控制"一文图 3 图注中"……($x_{max}=0$,其他条件与图 1 相同)"更正为"……($x_{max}=0.75$,$x_{min}=0$,其他条件与图 1 相同)".