第 52 卷 第 11 期 2003 年 11 月
1000-3290/2003/52(11)/2683-04

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.52, No.11, November, 2003

非厄米哈密顿量的物理意义*

陈增军　宁西京†

(复旦大学现代物理研究所，上海　200433)

(2002 年 12 月 16 日收到；2003 年 2 月 17 日收到修改稿)

分析了一个脉冲激光与原子相互作用的四能级系统，并考虑最上层能级的自电离过程，从而引入非厄米哈密顿量.在缀饰原子模型下，通过直接求解此哈密顿量的本征值与本征函数，得到系统布居的演化函数.与数值方法所得演化函数的对比表明二者相当符合，从而肯定了非厄米哈密顿量在量子力学框架中的地位，并得到其本征值虚部的物理意义.这将使传统量子力学中力学量的定义得以拓展.

关键词：非厄米哈密顿量，缀饰原子模型

PACC：0365，3280

1. 引　　言

众所周知，在量子力学中力学量算符应该是厄米的，因为厄米算符的本征值是实数，具有可测量的物理意义.然而，在处理具体问题时人们发现，引进非厄米的哈密顿量能够带来很大方便.在描述光场与多能级系统的相互作用过程中，为了考虑自发辐射或电离，衰减项经常被引入哈密顿量[1]，这实际上导致了一个非厄米的哈密顿量；Hatano 和 Nelson 利用非厄米哈密顿量描述超导体中的柱状缺陷[2—4]；Grigorenko 提出用非厄米哈密顿量建立非线性量子力学[5]；Day 等人采用非厄米哈密顿量紧耦合方法描写激光短脉冲作用时原子缀饰态的衰减[6].如果能够把非厄米哈密顿量普遍地纳入量子力学框架，即首先求解该非厄米哈密顿量的本征值方程，然后把系统的波函数展开为相应本征态的线性叠加，那将得到关于系统演化的解析解，为分析问题提供更大的方便.然而上述工作都没有回答这一基本的物理问题.

事实上，从纯理论的观点出发，没有充分的理由在量子力学中排斥非厄米算符.狄拉克在《量子力学原理》中写道：一个线性算符如果不是实算符(厄米算符特例)，那么关于它的本征值和本征矢量的理论在量子力学中没有很多用处.显然，狄拉克并没有完全否认非厄米力学量存在的可能性.

本文以激光与多能级系统相互作用为例，引入非厄米哈密顿量描写电离过程，并将其纳入量子力学框架，即先求解该非厄米哈密顿量的本征值方程，然后把系统的波函数展开为相应本征态的线性叠加，从而对其本征值的虚部给出了物理解释.为了检验上述处理方法的可靠性，在裸原子表象数值求解了含时薛定谔方程，在绝热近似条件下两种方法所得结果一致.据此我们相信在量子力学框架中普遍引入非厄米哈密顿量是可行的.

2. 非厄米哈密顿算符

考虑一个同时与三束激光相互作用的四能级原子系统(如图 1 所示)，其中$|i\rangle$代表裸原子系统哈密顿量的本征态，第四能级为自电离态，其自电离速率为 γ.事实上，这一系统不可避免地存在能级间的自发辐射过程，但是一方面，自发辐射速率相对于自电离过程而言很慢，可以忽略；另一方面，即便不可忽略，在完全量子化的理论框架中，自发辐射也不会导致非厄米力学量的出现.而自电离衰减却始终无法纳入量子力学框架，这必然导致一个非厄米哈密顿量(1 式)的出现，这一情况，在 Radmore 和 Knight[1]的工作中已经有所描述.

* 国家自然科学基金(批准号：20173011)及“中路-玻尔”奖学金资助的课题.

† 通讯联系人.E-mail：xjning@fudan.edu.cn

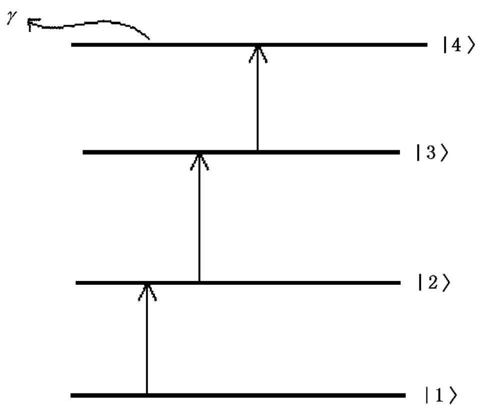

图 1 三光子-四能级原子系统

设三束激光场分别处于福克态$|n_1\rangle$，$|n_2\rangle$，$|n_3\rangle$，在旋转波近似下的非耦合态：$|1\rangle|n_1\rangle|n_2\rangle|n_3\rangle$，$|2\rangle|n_1-1\rangle|n_2\rangle|n_3\rangle$，$|3\rangle|n_1-1\rangle|n_2-1\rangle|n_3\rangle$，$|4\rangle|n_1-1\rangle|n_2-1\rangle|n_3-1\rangle$组成正交基[7]．在此基矢上可得到如下哈密顿量：

$$H=\hbar\begin{bmatrix}0 & \Omega_1/2 & 0 & 0\\ \Omega_1/2 & 0 & \Omega_2/2 & 0\\ 0 & \Omega_2/2 & 0 & \Omega_3/2\\ 0 & 0 & \Omega_3/2 & -i\gamma/2\end{bmatrix}. \tag{1}$$

显然，由于引入了自电离项，哈密顿量变为非厄米的．从传统量子力学的观点出发，这样的力学量不能描写物理实在．暂且先从数学上考虑这一矩阵的本征值和本征函数．

如设哈密顿量 H 的本征值为λ，则 λ 满足

$$\lambda^4+\left(\frac{\mathrm{i}\gamma}{2}\right)\lambda^3-\left(\frac{\Omega_1^2}{4}+\frac{\Omega_2^2}{4}+\frac{\Omega_3^2}{4}\right)\lambda^2+\left(\frac{\Omega_1^2}{4}+\frac{\Omega_2^2}{4}\right)\left(-\frac{\mathrm{i}\gamma}{2}\right)\lambda+\left(\frac{\Omega_1^2\Omega_3^2}{16}\right)=0. \tag{2}$$

方程的解可以表述为

$$\begin{cases}\lambda_1=\dfrac{-k+\sqrt{2q/k-2p-k^2}}{2}-\dfrac{a}{4},\\ \lambda_2=\dfrac{-k-\sqrt{2q/k-2p-k^2}}{2}-\dfrac{a}{4},\\ \lambda_3=\dfrac{k+\sqrt{-2q/k-2p-k^2}}{2}-\dfrac{a}{4},\\ \lambda_4=\dfrac{k-\sqrt{-2q/k-2p-k^2}}{2}-\dfrac{a}{4},\end{cases} \tag{3}$$

其中

$$\begin{cases}p=\dfrac{8b-3a^2}{8},\\ q=\dfrac{a^3-4ab+8c}{8},\\ r=\dfrac{-3a^4}{256}+\dfrac{a^2b}{16}-\dfrac{ac}{4}+d,\end{cases} \tag{4}$$

$$\begin{cases}a=\dfrac{\mathrm{i}\gamma}{2},\\ b=-\left(\dfrac{\Omega_1^2}{4}+\dfrac{\Omega_2^2}{4}+\dfrac{\Omega_3^2}{4}\right),\\ c=\left(-\dfrac{\mathrm{i}\gamma}{2}\right)\left(\dfrac{\Omega_1^2}{4}+\dfrac{\Omega_2^2}{4}\right),\\ d=\dfrac{\Omega_1^2\Omega_3^2}{16},\end{cases} \tag{5}$$

$$k=\sqrt{(\alpha+\beta-2p/3)}, \tag{6}$$

$$\begin{cases}\alpha=\sqrt[3]{-\dfrac{g}{2}+\sqrt{\dfrac{g^2}{4}+\dfrac{f^3}{27}}},\\ \beta=\sqrt[3]{-\dfrac{g}{2}-\sqrt{\dfrac{g^2}{4}+\dfrac{f^3}{27}}},\end{cases} \tag{7}$$

$$\begin{cases}f=-\dfrac{p^2+12r}{3},\\ g=\dfrac{-2p^3+72pr-27q^2}{27}.\end{cases} \tag{8}$$

从上面的表达式中可以看出，p，r 为实数，q 为纯虚数，因此 f，g 都成为实数．但是 α，β，k 则有可能成为实数或者纯虚数，因此矩阵本征值将为复数．与本征值相应的本征函数有如下形式：

$$\varphi_j=C_j\begin{pmatrix}1\\ 2\lambda_j/\Omega_1\\ (4\lambda_j^2-\Omega_1{}^2)/(\Omega_1\Omega_2)\\ 2\Omega_3(\lambda_j{}^2-\Omega_1{}^2/4)/(\mathrm{i}\gamma/2+\lambda_j)\Omega_1\Omega_2\end{pmatrix}, \tag{9}$$

其中

$$C_j=\frac{1}{\sqrt{1+\dfrac{4\lambda_j^2}{\Omega_1^2}+\dfrac{(4\lambda_j^2-\Omega_1^2)^2}{\Omega_1^2\Omega_2^2}+\dfrac{4\Omega_3^2(\lambda_j^2-\Omega_1^2/4)^2}{(\mathrm{i}\gamma/2+\lambda_j)^2\Omega_1^2\Omega_2^2}}}\quad(j=1,2,3,4).$$

我们尝试将系统总的波函数展开为上述本征态的线性叠加：

$$\Psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_{j=1}^{4}C_j(t)\varphi_j\exp\left(-\mathrm{i}\int_0^t\lambda_j(\xi)\mathrm{d}\xi\right), \tag{10}$$

虽然式中 $\lambda_j(j=1,2,3,4)$为复数，但总可以表示为实数与纯虚数之和，因此式中的指数部分可以表示

为一个振荡项与一个衰减项的乘积.

按上述公式,各个裸原子能级的布居变化函数可以表达如下:

$$P_i(t)=|\langle i|\Psi(r,t)\rangle|^2,\tag{11}$$

其解析表达式为

$$\begin{cases}P_1(t)=\left|\sum_{j=1}^{4}C_j^2(t)\exp\left(-\mathrm{i}\int_0^t\lambda_i(\xi)\mathrm{d}\xi\right)\right|^2,\\ P_2(t)=\left|\sum_{j=1}^{4}C_j^2(t)\frac{2\lambda_j}{\Omega_1}\exp\left(-\mathrm{i}\int_0^t\lambda_i(\xi)\mathrm{d}\xi\right)\right|^2,\\ P_3(t)=\left|\sum_{j=1}^{4}C_j^2(t)\frac{4\lambda_j^2-\Omega_1^2}{\Omega_1\Omega_2}\exp\left(-\mathrm{i}\int_0^t\lambda_i(\xi)\mathrm{d}\xi\right)\right|^2,\\ P_4(t)=\left|\sum_{j=1}^{4}C_j^2(t)\frac{2\Omega_3(\lambda_j^2-\Omega_1^2/4)}{\Omega_1\Omega_2(\mathrm{i}\gamma/2+\lambda_j)}\exp\left(-\mathrm{i}\int_0^t\lambda_i(\xi)\mathrm{d}\xi\right)\right|^2,\end{cases}\tag{12}$$

其中$\langle i|$为第 i 个能级的裸原子态的左矢.(12)式中的参数由(3)—(9)式确定.根据(12)式,即可得到系统各个能级布居变化的情况.

在实际的激光与原子相互作用系统中,Rabi 频率 $\Omega_i(i=1,2,3)$一般是时间的函数,因此(10)式中各本征态 φ_i 之间的非绝热耦合不可避免[7,8],即便对于厄米哈密顿量也是如此.但是如果原子所‘感受’到的激光脉冲足够强,且随时间变化足够慢,则绝热条件可以很好地满足,使得本征态之间的非绝热跃迁概率小到忽略不计[7,8].

相对于通常所用的数值解法(见下一部分),上述解析方法的优越性在于能够给出普遍适用的结果,对于解释和预测系统的布居演化具有普遍性.

3. 与数值计算结果的比较

通常在处理激光与多能级系统相互作用问题时,人们更加倾向于使用数值方法.为了说明上一节所述解析方法的正确性,下面作了一些数值计算,并与解析结果比较.

首先,简单说明数值计算方法.在量子力学理论中,图 1 的问题可以用一个含时薛定谔方程表示:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}=H\varphi.\tag{13}$$

在裸原子态表象下,φ 表示为下列向量:

$$\varphi=\begin{pmatrix}C_1\\C_2\\C_3\\C_4\end{pmatrix},\tag{14}$$

其中 $C_i(i=1,2,3,4)$为各个能级上布居的概率振幅.把 φ 的表达式代入(13)式,则可以得到

$$\begin{cases}\mathrm{i}\dot{C}_1=\frac{\Omega_1}{2}C_2,\\ \mathrm{i}\dot{C}_2=\frac{\Omega_1}{2}C_1+\frac{\Omega_2}{2}C_3,\\ \mathrm{i}\dot{C}_3=\frac{\Omega_2}{2}C_2+\frac{\Omega_3}{2}C_4,\\ \mathrm{i}\dot{C}_4=\frac{\Omega_3}{2}C_3-\mathrm{i}\frac{\gamma}{2}C_4,\end{cases}\tag{15}$$

其中 $\Omega_i(i=1,2,3)$为 Rabi 振荡频率.一般情况下,激光输出的脉冲大都为高斯型,故将 Rabi 频率的表达式写为 $\Omega=\Omega_0\mathrm{e}^{-t^2}$,为了保证绝热条件的满足[7,8],选取了较大的 Rabi 频率,即 $\Omega_0=8\times10^{11}$ rad/s.按照(15)式,运用龙格-库塔积分方法,在步长为 7.2×10^{-14}s 情况下可得到 C_j 的值,再由

$$P_j(t)=|C_j(t)|^2,\tag{16}$$

得到各个能级布居数随时间的演化.假设最初布居全部在$|1\rangle$,激光脉冲的半宽为 4ns,第四能级上的自发电离速率 $\gamma=8\times10^{11}$/s.由数值方法和解析方法所得结果分别示于图 2 和图 3.可以看出,图 2 与图 3 非常相似,说明两种方法所得结果非常接近.细致的比较分析表明,二者的误差最大时不超过 10%.

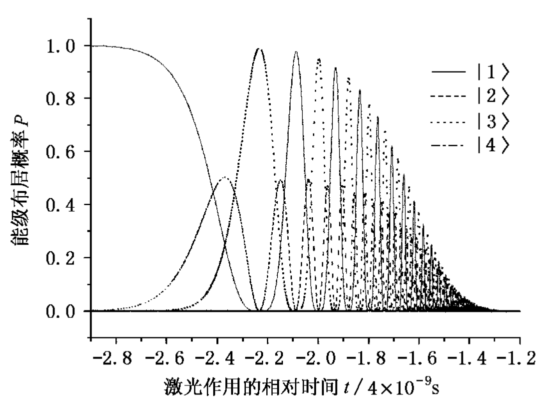

图 2　采用数值方法得到的各能级布居演化曲线　4 条曲线分别为 4 个能级的布居变化

此外,我们看到系统各个能级的布居随时间变化分别递减至零,而通过解析方法的计算我们也发现得到的系统本征值的虚部均为负数,这说明复数本征值虚部的物理意义就是系统布居衰减的反映.因此非厄米的哈密顿量也不再是没有‘用处’的力学量,它可以用来表示一个能级随时间而变化的系统,所以复数本征值扩展了传统量子力学中本征值的

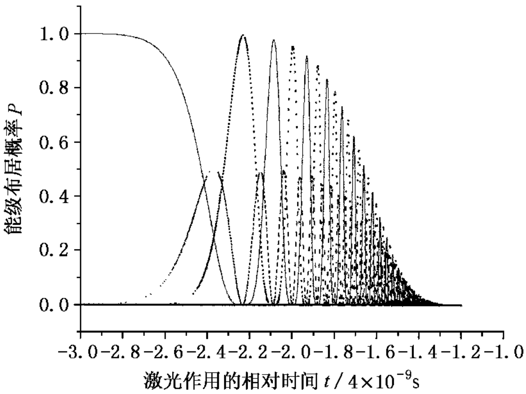

图3 采用解析方法得到的各能级布居演化曲线 图注同图2

含义.

在文献[7]关于激光分离同位素过程中布居囚禁现象的研究中,也对一个五能级系统采用了解析方法,并且数值计算的结果也验证了解析方法的正确性.然而,这些工作只是"局部"的验证,尚缺少全面的理论分析.本文的结论有力地支持了他们的结果.

4. 结 论

通过激光与多能级系统作用这样一个例子,分别利用数值方法和解析方法求解,等效的结果表明非厄米哈密顿量同样具有物理意义,即哈密顿量本征值的虚数部分描写了系统布居数的衰减.本文的结果还给人们这样一种启示:即从更加一般的角度考虑,量子力学中对于力学量算符必须为厄米算符的要求是否过于严格.

[1] Radmore P M and Knight P L 1982 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15** 561

[2] Hatano N and Nelson D R 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 570

[3] Hatano N, Nelson D R 1997 *Phys. Rev.* B **56** 8651

[4] Hatano N 1998 *Physica* A **254** 317

[5] Grigorenko A N 1993 *Phys. Lett.* A **172** 350

[6] Day H C *et al* 2000 *Phys. Rev.* A **61** R031402

[7] Ning X J, Lin F C and Jing C Y 1998 *Acta Opt. Sin.* **18** 431 (in Chinese)[宁西京、林福成、景春阳 1998 光学学报 **18** 431]

[8] Long D S and Ning X J 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2335 (in Chinese)[龙德顺、宁西京 2001 物理学报 **50** 2335]

Physical meaning of non-Hermitian Hamiltonian*

Chen Zeng-Jun Ning Xi-Jing†

(*Institute of Modern Physics, Fudan University, Shanghai* 200433, *China*)

(Received 16 December 2002; revised manuscript received 17 February 2003)

Abstract

A four-level system coupled with lasers is analyzed in terms of dressed-atom model by introducing auto-ionization decay which leads to a non-Hermitian Hamiltonian. The population of the system obtained by means of solving the secular equation of the Hamiltonian is found in good agreement with that from numerical solution of time-dependent Schrödinger equation. This result suggests that non-Hermitian Hamiltonian can be introduced into the framework of quantum mechanics, and the imaginary part of the corresponding eigenvalue represents the population decaying of systems.

Keywords: non-Hermitian Hamiltonian, dressed-atom model

PACC: 0365, 3280

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 20173011), and the "Zhong Lu-Bohr" Fellowship.

† Corresponding author. E-mail: xjning@fudan.edu.cn