



类氢原子核质量对电子状态的影响

刘兆斌 李凯 曾天海 王锋 宋新兵 邵彬 邹健

Influence of hydrogen-like nucleus mass on electronic state

Liu Zhao-Bin Li Kai Zeng Tian-Hai Wang Feng Song Xin-Bing Shao Bin Zou Jian

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 070301 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20201754

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201754>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于量子催化的离散调制连续变量量子密钥分发

Discrete modulation continuous-variable quantum key distribution based on quantum catalysis

物理学报. 2020, 69(6): 060301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191689>

微波连续变量极化纠缠

Continuous variable polarization entanglement in microwave domain

物理学报. 2019, 68(6): 064204 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181911>

用于实现散射介质中时间反演的数字相位共轭的相干性

Coherence of digital phase conjugation for implementing time reversal in scattering media

物理学报. 2018, 67(5): 054201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172308>

基于电磁诱导透明机制的压缩光场量子存储

Analysis of electromagnetically induced transparency based on quantum memory of squeezed state of light

物理学报. 2017, 66(7): 074201 <https://doi.org/10.7498/aps.66.074201>

实验条件不完美对薛定谔猫态制备的影响

Effect of imperfect experimental condition on generation of Schrödinger cat state

物理学报. 2018, 67(23): 234203 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180381>

上海光源硬X射线相干衍射成像实验方法初探

Preliminary exploration of hard X-ray coherent diffraction imaging method at SSRF

物理学报. 2020, 69(3): 034102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191586>

类氢原子核质量对电子状态的影响*

刘兆斌 李凯 曾天海[†] 王锋 宋新兵 邵彬 邹健

(北京理工大学物理学院, 北京 100081)

(2020年10月22日收到; 2020年11月16日收到修改稿)

在孤立的两体复合系统中, 讨论其中一体的变化如何影响另一体的状态, 有助于了解单粒子混合态与纯态的关系. 本文讨论5个孤立的一维类氢原子模型系统, 原子核的质量互不相同. 这5个两体(电子与原子核)复合系统的相对运动状态都处于纠缠态, 其中电子状态都用约化密度矩阵表示的混合态描述. 在原子核质量趋近无穷大的一维氢原子模型中, 电子处于纯态. 为比较这里的纯态和混合态, 在位置表象中计算了这些混合态的纯度、它们分别与纯态的保真度、以及所有这些态的相干性. 研究表明, 原子核的质量越大, 纯度和保真度越接近1, 混合态的相干性与纯态的也越接近. 这样的纯态及其相干性可以是这种混合态及其相干性的近似, 并与原子核及库仑相互作用有关.

关键词: 混合态, 保真度, 相干性, 连续变量

PACS: 03.65.-w, 03.65.Ta

DOI: 10.7498/aps.70.20201754

1 引言

单个粒子可以处于纯态或混合态. 在量子信息传输中, 单粒子的初始纯态一般会变为混合态. 很难制备单粒子纯态, 得到的一般是混合态. 如何得到接近纯态的混合态是个有意义的问题. 在孤立的氢原子模型中, 假设原子核质量趋近无穷大, 则其电子处于纯态. 但考虑氢原子核的质量, 那么, 核与电子处于纠缠态^[1,2](即不能写成原子核状态与电子态的直积态), 电子处于混合态. 对于不同的类氢原子, 其核质量不同, 它们的电子混合态也会不同. 核质量越大, 电子混合态自然越接近相应的纯态. 本文定量讨论混合态与纯态是如何接近的.

讨论5个一维类氢原子系统, 它们具有相同的电子和库仑相互作用势能, 而原子核的质量不同. 假设前两个原子的核质量与电子的比为10和100, 后三个是氘、氚和氦原子, 质量比约为1836, $2 \times$

1836和 3×1836 . 它们均可以看成两体复合系统, 这些两体复合系统都处于纠缠态, 可以用密度矩阵表示. 对密度矩阵的一部分求迹, 得到的约化密度矩阵^[3,4]表示另一部分的状态为混合态. 在假设的原子核质量为无穷大的一维氢原子中, 电子处于纯态. 把这5种情形的电子混合态及其相干性与纯态及其相干性进行比较. 比较的方式是用纯度^[5]、保真度^[6-10]和相干性^[11-22]进行定量计算. 根据定义, 纯度定量表征混合态中的纯态“含量”. 纯度越高, 越接近纯态; 纯度为1的即为纯态. 保真度可以用来定量比较两个量子态的接近程度. 若值为1, 则两个态相同. 量子态的相干性与选取的表象有关, 若在所选的表象中为本征态, 则没有相干性; 纯态的相干性表征干涉的对比度; 而对于一个混合态, 相干性则表征了所有纯态成分的干涉或相干的大小总和.

本文第2节引用一维类氢原子的两体模型, 计算第一激发态及其与第二激发态的叠加态中的电

* 国家自然科学基金(批准号: 11674024, 11875086)和北京市自然科学基金(批准号: 2192049)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: zengtianhai@bit.edu.cn

子混合态密度矩阵. 第 3 节计算这些混合态的纯度、与相应纯态之间的保真度、以及用 l_1 norm 定量的混合态和纯态的相干性.

2 模型

这里采用简单的孤立一维氢原子模型 [1,23,24]. 用薛定谔方程求解这样的两体问题, 可以分成质心运动和相对运动两部分. 质心运动相当于自由粒子运动. 文献 [3] 指出, 自由粒子的初始能量可以为零. 因此, 设质心不动, 为坐标原点. 只需考虑相对运动. 对于原子核质量趋近无穷大的一维氢原子, 文献 [23,24] 给出了其定态薛定谔方程的波函数偶宇称和奇宇称的表达式:

$$\psi_n^+(x) \subset \begin{cases} xF\left(1-n, 2, \frac{2x}{na}\right) e^{-x/na}, & x > 0, \\ -xF\left(1-n, 2, -\frac{2x}{na}\right) e^{-x/na}, & x < 0, \end{cases} \quad (1)$$

$$\psi_n^-(x) = \begin{cases} \psi_n^+(x), & x > 0, \\ -\psi_n^+(x), & x < 0, \end{cases} \quad (2)$$

其中 F 为合流超几何函数, a 是玻尔半径, $\psi_n^+(x)$ 和 $\psi_n^-(x)$ 都是实函数.

由于系统相对运动的基态为 $\sqrt{\delta}$ 函数 [1], 不利于计算, 所以选取第一激发态偶宇称波函数和第一与第二激发态偶宇称波函数的叠加态进行计算. 同时, 为了表述的问题方便计算, 取 $\hbar = 1$, $e = 1$, $m_e = 1$, 则电子在原子核质量趋近无穷大的一维氢原子中的运动, 其归一化的第一激发态偶宇称波函数可写成

$$\psi_1^+(x) = \sqrt{2}|x|e^{-|x|}. \quad (3)$$

归一化的第一与第二激发态偶宇称波函数的叠加态可写成

$$\psi_{12}^+(x) = \frac{\sqrt{2}}{2} \left[\sqrt{2}|x|e^{-|x|} + \sqrt{\frac{1}{4}} \left(|x| - \frac{|x|^2}{2} \right) e^{-|x|/2} \right]. \quad (4)$$

当考虑原子核的质量时, 第一激发态偶宇称波函数变为

$$\phi_1^+(x_e, x_p) = b' |x_e - x_p| e^{\frac{-|x_e - x_p|}{1+1/m_p}}, \quad (5)$$

第一与第二激发态偶宇称波函数的叠加态变为

$$\begin{aligned} \phi_{12}^+(x_e, x_p) = & \frac{\sqrt{2}}{2} \left[b' |x_e - x_p| e^{\frac{-|x_e - x_p|}{1+1/m_p}} \right. \\ & \left. + c' \left(|x_e - x_p| - \frac{|x_e - x_p|^2}{2} \right) e^{\frac{-|x_e - x_p|}{2(1+1/m_p)}} \right], \quad (6) \end{aligned}$$

其中 x_e 和 x_p 分别是电子和原子核的位置坐标; m_p 是原子核质量; b' 和 c' 是相应第一和第二激发态偶宇称波函数的归一化常数, 数值大小随所取的原子核质量的大小不同而不同, 并能通过求全空间概率为 1 得到具体数值. $\phi_1^+(x_e, x_p)$ 和 $\phi_{12}^+(x_e, x_p)$ 都是实函数. 相应的密度矩阵为: $\rho_1 = |\phi_1^+\rangle \langle \phi_1^+|$ 和 $\rho_{12} = |\phi_{12}^+\rangle \langle \phi_{12}^+|$. 假设电子为粒子 1, 原子核为粒子 2. 对粒子 2 部分求迹可得到电子的约化密度矩阵 $\rho_1^{(1)} = \text{tr}_2 \rho_1$ 和 $\rho_{12}^{(1)} = \text{tr}_2 \rho_{12}$, 表示电子的混合态. 在位置表象中, 位置有连续本征值谱 [4], 相应的约化密度矩阵元分别表示为

$$\left(\rho_1^{(1)}\right)_{x_e x_e'} = \int \phi_1^+(x_e, x_p) \phi_1^+(x_e', x_p) dx_p, \quad (7)$$

$$\left(\rho_{12}^{(1)}\right)_{x_e x_e'} = \int \phi_{12}^+(x_e, x_p) \phi_{12}^+(x_e', x_p) dx_p, \quad (8)$$

其中 x_e 和 x_e' 分别表示约化密度矩阵的行和列.

3 纯度、保真度和相干性计算

3.1 纯度的计算

混合态的纯度的一种定义 [5] 为

$$P(\rho) = \text{tr}(\rho^2), \quad (9)$$

在位置表象中, 求迹写成积分. 对于约化密度矩阵 $\rho_1^{(1)}$ 和 $\rho_{12}^{(1)}$, 其纯度计算公式可分别表示为

$$P_1\left(\rho_1^{(1)}\right) = \iint \left(\rho_1^{(1)}\right)_{x_e x_e'} \left(\rho_1^{(1)}\right)_{x_e' x_e} dx_e dx_e', \quad (10)$$

$$P_{12}\left(\rho_{12}^{(1)}\right) = \iint \left(\rho_{12}^{(1)}\right)_{x_e x_e'} \left(\rho_{12}^{(1)}\right)_{x_e' x_e} dx_e dx_e'. \quad (11)$$

按照上述 $\hbar = 1$, $e = 1$, $m_e = 1$ 的设定, 当积分区间取 $[-20, 20]$ 范围内时, 第一激发态和叠加态偶宇称波函数所表示的概率非常接近 1, 所以电子的积分区间取 $[-20, 20]$. 根据两体问题的运动关系, 相应的原子核的积分区间取为 $\left[\frac{-20}{m_p}, \frac{20}{m_p}\right]$, 其中 m_p 是原子核的质量.

考虑 5 个一维类氢原子系统, 分别计算了原子核质量取不同值时, 电子混合态的纯度的变化趋势, 即 $\text{tr}\left(\rho_1^{(1)}\right)^2$ 和 $\text{tr}\left(\rho_{12}^{(1)}\right)^2$ 的变化趋势.

图 1 为纯度变化趋势图, 可以看出, 原子核的质量越大, 电子混合态的纯度越高, 并非非常接近 1. 对于氘、氚和氦原子, 电子混合态都近似于某个纯态. 反之, 说明一个纯态是由混合态近似而来的.

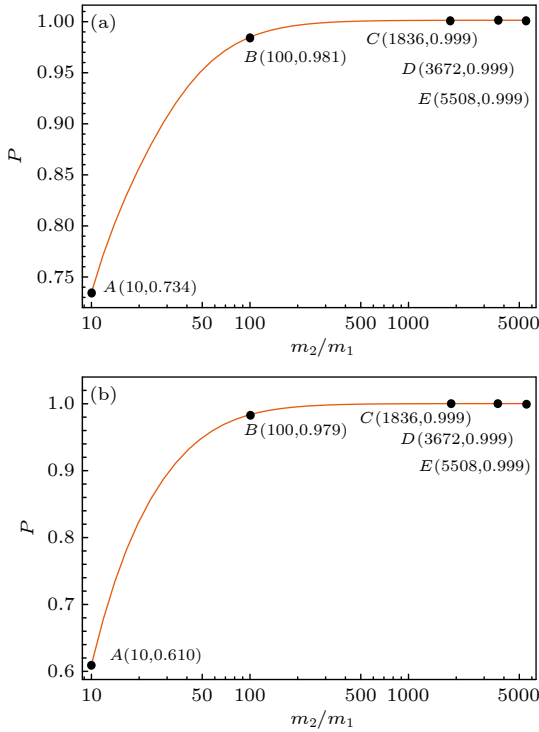


图 1 纯度变化趋势图, 横坐标表示原子核质量和电子质量之比 (a) 第一激发态; (b) 叠加态
Fig. 1. Purity vs. the ratio of mass between nucleus and electron: (a) The first excited state; (b) the superposition of the first and the second excited states.

3.2 保真度的计算

混合态与纯态之间的保真度定义 [9] 为

$$F(|\psi\rangle, \rho) = \langle \psi | \rho | \psi \rangle. \quad (12)$$

仍然利用积分计算 ψ_1^+ 和 $\rho_1^{(1)}$ 以及 ψ_{12}^+ 和 $\rho_{12}^{(1)}$ 的保真度

$$F_1(\psi_1^+, \rho_1^{(1)}) = \iint \psi_1^+(x_e) (\rho_1^{(1)})_{x_e x'_e} \psi_1^+(x'_e) dx_e dx'_e, \quad (13)$$

$$F_{12}(\psi_{12}^+, \rho_{12}^{(1)}) = \iint \psi_{12}^+(x_e) (\rho_{12}^{(1)})_{x_e x'_e} \psi_{12}^+(x'_e) dx_e dx'_e, \quad (14)$$

两个保真度变化趋势如图 2 所示.

从图 2 可以看出, 原子核的质量越大, 保真度越大, 电子混合态与相应的纯态也越接近. 在氘、氚和氦原子情形, 保真度都接近 1, 说明电子混合

态都近似于纯态. 反之, 说明这两个纯态都是由相应混合态近似而来的.

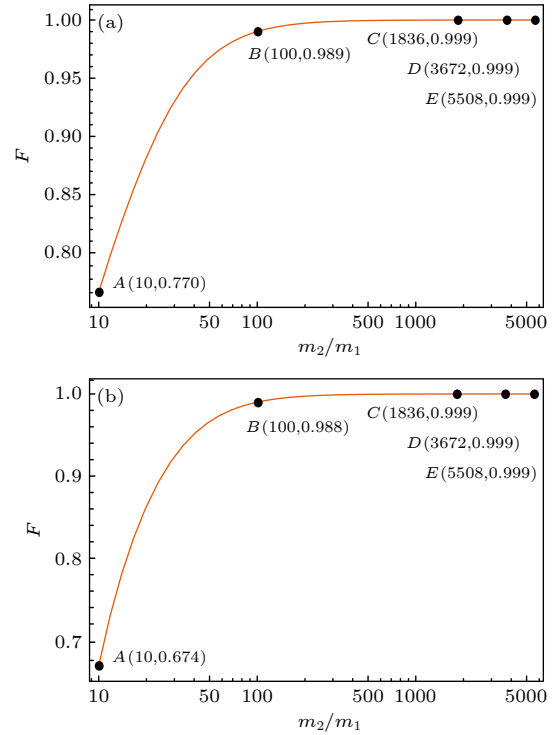


图 2 保真度变化趋势图, 横坐标表示原子核质量和电子质量之比 (a) 第一激发态; (b) 叠加态
Fig. 2. Fidelity vs. the ratio of mass between nucleus and electron: (a) the first excited state; (b) the superposition of the first and the second excited states.

3.3 相干性的计算

量子态的相干性是相对特定表象而言的. 在能量表象中, 这里的电子第一激发态是能量本征态, 没有相干性. 但在位置表象中, 第一激发态是位置本征态的叠加态, 是有相干性的. 第一与第二激发态的叠加态在这两个表象中, 都有相干性. 这里也采用位置表象. 量子态 l_1 norm 相干性定义 [13] 为: $C_{l_1}(\sigma) = \sum_{i \neq j} |\sigma_{ij}|$. 在采用位置表象后, 求和改成积分的形式

$$C_{l_1}(\sigma) = \iint |\sigma_{x_e x'_e}| dx_e dx'_e - 1. \quad (15)$$

分别计算 $\psi_1^+(x)$ 和 $\psi_{12}^+(x)$ 以及 $\rho_1^{(1)}$ 和 $\rho_{12}^{(1)}$ 的相干性, 并得到了混合态的相干性随原子核质量变化的趋势图, 如图 3 所示.

从图 3 可以看出, 原子核的质量越大, 电子混合态的相干性与相应纯态的相干性越接近. 也说明氘、氚和氦原子中, 电子混合态的相干性都近似于

相应纯态的相干性.

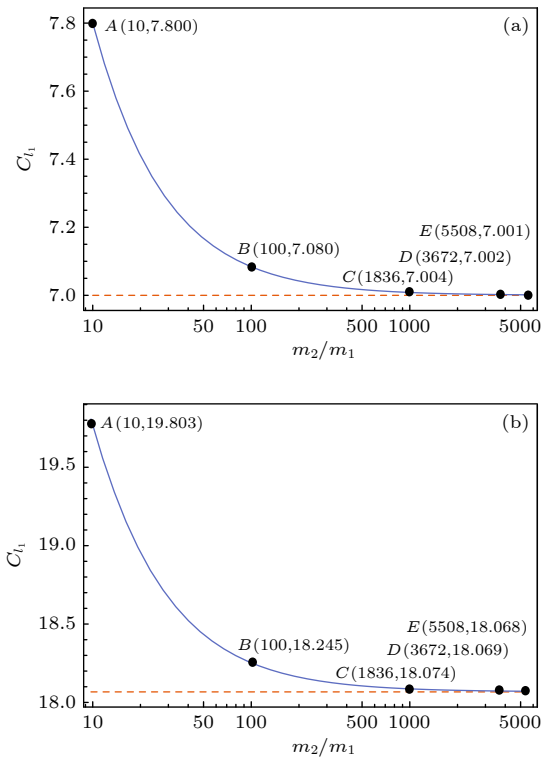


图 3 相干性变化趋势图, 横坐标表示原子核质量和电子质量之比 (a) 第一激发态; (b) 叠加态
Fig. 3. Coherence vs. the ratio of mass between nucleus and electron: (a) The first excited state; (b) the superposition of the first and the second excited states.

3.4 讨论

与纯度和保真度不同的是, 这里得到的电子混合态的相干性不是随原子核质量的增大而增大, 而是相反. 这可以做如下解释: 在特定表象中, 若纯态是本征态, 则没有相干性; 而混合态的成分中, 有不同本征态的相干叠加态, 则相干性不为零. 例如, 某一表象有三个本征态基矢 $\{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3\}$, 若纯态是其中任一本征态, 则相干性为零; 而混合态中出现纯态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 + \varphi_2)$ 的概率为 $1/3$, 出现纯态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 + \varphi_3)$ 的概率为 $2/3$, 则相干性不为零. 说明混合态的相干性可以大于纯态的相干性.

虽然相干性变化规律与保真度不同, 但仍然说明这两个纯态的相干性都是由相应混合态近似而来的. 这里的电子混合态及其相干性, 都是与原子核及它们的库仑相互作用势能有关的. 这是因为这样的两体复合系统的哈密顿量含有原子核的动能算符和库仑相互作用势能算符, 电子与原子核的

纠缠态就与原子核质量和库仑相互作用有关. 若原子核质量很大, 它就近似不动或它的状态近似不变, 库仑相互作用势能也近似为电子的外场库仑势能. 换一个角度看, 原子核与电子的纠缠态近似为核的不变状态与电子态的直积态^[25–30]. 这样, 电子的纯态就是近似的, 这个纯态及其相干性就与原子核及它们的库仑相互作用势能有关.

这个特例有可能推广到其它孤立的两体复合系统中进行定量计算. 其一体保持为微观体不变, 相互作用势能也不变, 而另一体由微观体换成宏观体. 那么, 微观体在宏观体的势场中运动, 其状态近似为纯态, 并在一些表象中显示相干性. 因此, 这个纯态及其相干性与宏观体有关, 并与相互作用势能 (即近似的外场) 有关.

4 结论

本文利用纯度、保真度和相干性, 对一维类氢原子中的电子状态随核质量的变化进行了定量计算. 结果表明, 一维类氢原子核质量趋近无穷大的电子纯态及其相干性, 可以由一维类氢原子中电子的混合态及其相干性近似而来. 这种电子混合态及其相干性与原子核及它们的库仑相互作用势能有关, 因而, 电子的这种纯态及其相干性也是如此. 说明存在单粒子的一些纯态及其相干性是混合态及其相干性的近似, 并且这些态及其相干性与其他物体及相互作用有关.

参考文献

- [1] Zeng J Y 2007 *Quantum Mechanics* (Vol. 1) (Beijing: Science Press) pp305–307, 235–238 (in Chinese) [曾谨言 2007 量子力学 (卷 I) (北京: 科学出版社) 第305—307, 235—238 页]
- [2] Zhang Y D 2017 *Quantum Mechanics* (Beijing: Science Press) p21 (in Chinese) [张永德 2017 量子力学 (北京: 科学出版社) 第 21 页]
- [3] Landau L D, Lifshitz E M 2007 *Quantum Mechanics* (Singapore: Elsevier Pte Ltd.) pp39, 51
- [4] Ka X L 2001 *Advanced Quantum Mechanics* (Beijing: Higher Education Press) pp192–199, 84–88 (in Chinese) [喀兴林 2001 高等量子力学 (北京: 高等教育出版社) 第 192—199, 84—88 页]
- [5] Gamel O, James D F V 2012 *Phys. Rev. A* **86** 033830
- [6] Uhlmann A 1976 *Rep. Math. Phys.* **9** 273
- [7] Jozsa R 1994 *J. Mod. Opt.* **41** 2315
- [8] Nielsen M A, Chuang I L 2003 *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge: Cambridge University Press) pp409–413
- [9] Li C Z, Huang M Q, Chen P X, Liang L M 2000 *Quantum Communication and Quantum Computation* (Changsha:

- University of National Defence Technology Press) pp130–131 (in Chinese) [李承祖, 黄明球, 陈平行, 梁林梅 2000 量子通信和量子计算 (长沙: 国防科技大学出版社) 第130—131页]
- [10] Hou J C, Qi X F 2012 *Sci. China, Ser. G* **55** 1820
- [11] Aberg J 2006 *arXiv*: 0612146 [quant-ph]
- [12] Bartlett S D, Rudolph T, Spekkens R W, Turner P S 2006 *New J. Phys.* **8** 58
- [13] Baumgratz T, Cramer M, Plenio M B 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 140401
- [14] Chen J X, Grogan S, Johnston N, Li C K, Plosker S 2016 *Phys. Rev. A* **94** 042313
- [15] Yu X D, Zhang D J, Liu C L, Tong D M 2016 *Phys. Rev. A* **93** 060303
- [16] Hu M L, Hu X, Wang J C, Peng Y, Zhang Y R, Fan H 2017 *arXiv* 1703.01852 [quant-ph]
- [17] Qi X F, Gao T, Yan F L 2017 *J. Phys. A: Math. Theor.* **50** 285301
- [18] Song X K, Huang Y Q, Ling J J, Yung M H 2018 *Phys. Rev. A* **98** 050302
- [19] Zhou G Y, Huang L J, Pan J Y, Hu L Y, Huang J H 2018 *Front. Phys.* **13** 130701
- [20] Yu C S, Li D M, Zhou N N 2019 *EPL* **125** 50001
- [21] Li K, Liu Z B, Zeng T H 2019 *Int. J. Theor. Phys.* **58** 3252
- [22] Lü X 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 070301 (in Chinese) [吕鑫 2020 物理学报 **69** 070301]
- [23] Loudon R 1959 *Am. J. Phys.* **27** 649
- [24] Qian B C 1989 *College Physics* **7** 5 (in Chinese) [钱伯初 1989 大学物理 **7** 5]
- [25] Bertet P, Osnaghi S, Rauschenbeutel A, Nogues G, Auffeves A, Brune M, Raimond J M, Haroche S 2001 *Nature* **411** 166
- [26] Zeng T H 2013 *arXiv*: 1307.1851 [gen-ph]
- [27] Fayngold M, Fayngold V 2013 *Quantum Mechanics and Quantum Information* (Germany: Wiley-VCH) p603
- [28] Zeng T H 2016 *College Physics* **35** 20 (in Chinese) [曾天海 2016 大学物理 **35** 20]
- [29] Zeng T H 2017 *Modern Physics* **7** 8 (in Chinese) [曾天海 2017 现代物理 **7** 8]
- [30] Zeng T H, Sun Z Z, Shao B 2020 *Int. J. Theor. Phys.* **59** 229

Influence of hydrogen-like nucleus mass on electronic state*

Liu Zhao-Bin Li Kai Zeng Tian-Hai[†] Wang Feng

Song Xin-Bing Shao Bin Zou Jian

(School of Physics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

(Received 22 October 2020; revised manuscript received 16 November 2020)

Abstract

In an isolated two-body composite system, the discussion of how the change of one body affects the state of the other will help to know the relation of a single particle's mixed and pure states. Given 5 one-dimensional hydrogen-like atoms models, each Coulomb interaction potential keeps invariant, while the masses of the nuclei are different. These two-body composite systems stay in their respective entangled state, each electron stays in a mixed state. If we suppose a one-dimensional hydrogen atom model having infinite nuclear mass, the electron stays in a pure state. We select position representation. The wave function of the ground state of the atom has the form of the square root of a δ function. To avoid calculation trouble of δ function, we select the first excited state and the superposed state of the first and the second excited states. We compare the two pure states, the first excited state and the superposed state, with those corresponding mixed states by fidelity and l_1 norm coherence, and calculate the purities of the mixed states. The summations become integrations due to the position variable having a continuous eigenvalue spectrum. We investigate the changes in these quantities with the increase of the nuclear mass. The results show that the purities of the mixed states and the fidelities increase with the nuclear mass increasing. However, the coherences of the mixed states decrease with the nuclear mass increasing. This can be explained as that a mixed state with non-zero coherence may approach to a pure eigenstate, while the latter has zero coherence in the eigenspace. These mean that the greater a nuclear mass is, the closer the mixed state approaches to the corresponding pure state. Therefore, the two pure states are the approximations of the corresponding mixed states. The entangled state of the electron and the nucleus is related with the nuclear mass and the Coulomb interaction potential. So, each electron mixed state and its coherence are related with the nucleus and their Coulomb interaction potential. If the nuclear mass is great, the nucleus is approximately motionless or its state is approximately unchanged, and the Coulomb interaction potential approximates to the external Coulomb potential of the electron. The electron approximately stays in a pure state. The state and its coherence are related with the nucleus and the Coulomb interaction. From other point of view, the entangled state of the nucleus and the electron approximates to the product state of the unchanged nucleus state and the electron state. In this case, an electron mixed state approximates to its corresponding pure state, and then these states and their coherences are all related with the nucleus and the Coulomb interaction.

Keywords: mixed state, fidelity, coherence, continuous variable**PACS:** 03.65.-w, 03.65.Ta**DOI:** [10.7498/aps.70.20201754](https://doi.org/10.7498/aps.70.20201754)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11674024, 11875086) and the Natural Science Foundation of Beijing, China (Grant No. 2192049).

[†] Corresponding author. E-mail: zengtianhai@bit.edu.cn