

氢 原 子 相 干 态

许 伯 威 曾 祺

上海交通大学物理系, 上海, 200030

1990 年 9 月 7 日收到

由 Kustannheimo-Stiefel 变换, 可将量子力学中的氢原子问题化为带有约束条件的四维各向同性谐振子。在此基础上定义相干态, 并证明力学量坐标和动量对相干态的平均, 给出经典开普勒运动轨道。同时也讨论该相干态中的测不准关系式。

PACC:0365

一、引 言

相干态的概念是薛定谔在 1926 年提出的^[1], 即认为量子力学中的力学量对相干态平均, 给出对应动力学系统的经典运动, 并首先在谐振子系统中得到了这种相干态。这种相干态为谐振子湮没算符的本征态, 也可将谐振子基态经么正变换得到, 同时可证在谐振子相干态中有最小测不准关系式^[2]。事实上对谐振子系统, 可由以上所述的任一性质来定义相干态, 因彼此是协调统一的。但对非谐振子动力学系统, 情况则不然, 所以对相干态的定义没有统一的标准。但作者认为薛定谔的原始概念, 即认为应给出对应的经典运动来定义相干态较为合适。这样定义的相干态给出量子力学和经典力学的某种联系。推广到场论, 将给出量子场论和经典场论的某种联系, 这对应用经典场论中的解来研究对应的量子场论是有意义的^[3,4]。

本文讨论的是氢原子相干态。这方面已有不少工作, 给出了三维氢原子和四维谐振子的等价关系^[5-7], 定义了相干态, 并证明这样定义的相干态给出经典运动方程^[8]。但在证明过程中似可有进一步完善之处, 另外, 对该相干态中的测不准关系式也未作讨论。本文将对此作出补充。

二、氢原子的 O_4 对称性

氢原子哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2\mu} P^2 - \frac{e^2}{r}, \quad (1)$$

具有 O_4 对称性^[9], O_4 群的算子为

$$L = r \times P, \quad (2)$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\sqrt{-2\mu H}} \left[\frac{1}{2} (\mathbf{L} \times \mathbf{P} - \mathbf{P} \times \mathbf{L}) + \mu e^2 \frac{\mathbf{r}}{r} \right], \quad (3)$$

有以下性质:

$$[\mathbf{L}, H] = [\mathbf{A}, H] = 0, \quad (4a)$$

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} = i\hbar \mathbf{L}, \quad \mathbf{L} \times \mathbf{A} = i\hbar \mathbf{A}, \quad \mathbf{A} \times \mathbf{A} = i\hbar \mathbf{L}, \quad (4b)$$

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (4c)$$

$\mathbf{L}$ 和 $\mathbf{A}$ 之 Schwinger 表示可写成^[10]

$$\mathbf{L} = \frac{1}{2} \left[(b_1^\dagger b_2^\dagger) \boldsymbol{\sigma} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} + (b_3^\dagger b_4^\dagger) \boldsymbol{\sigma} \begin{pmatrix} b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} \right], \quad (5)$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \left[(b_1^\dagger b_2^\dagger) \boldsymbol{\sigma} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} - (b_3^\dagger b_4^\dagger) \boldsymbol{\sigma} \begin{pmatrix} b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} \right], \quad (6)$$

式中 $\boldsymbol{\sigma}$ 为泡利矩阵, 而

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1 + ia_2), & b_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a_3 - ia_4), \\ b_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1 - ia_2), & b_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a_3 + ia_4), \end{aligned} \quad (7)$$

a_μ 和 b_μ 都为玻色算符, 满足

$$[a_\mu, a_\nu^\dagger] = [b_\mu, b_\nu^\dagger] = \delta_{\mu\nu}. \quad (8)$$

即 O_4 群算子可表成四维玻色算符, 而约束条件 (4c) 式则对应

$$a_1^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_3^\dagger a_4 + a_4^\dagger a_3 = 0. \quad (9)$$

如像通常那样引入四维正则量 q_μ 和 π_μ

$$\begin{aligned} a_\mu &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega q_\mu + i\pi_\mu), \\ a_\mu^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega q_\mu - i\pi_\mu), \end{aligned} \quad (10)$$

则有

$$[q_\mu, \pi_\nu] = i\hbar \delta_{\mu\nu}. \quad (11)$$

而约束条件则可写成

$$X \equiv q_2 \frac{\partial}{\partial q_1} - q_1 \frac{\partial}{\partial q_2} - q_4 \frac{\partial}{\partial q_3} + q_3 \frac{\partial}{\partial q_4} = 0. \quad (12)$$

三、相干态

三维氢原子和四维 q_μ 空间谐振子之间等价关系, 是通过 Kustannheimo-Stiefel 变换相联系的, 即有^[11]

$$\begin{aligned} x_1 &= 2(q_1 q_3 - q_2 q_4), & x_2 &= 2(q_1 q_4 + q_2 q_3), \\ x_3 &= q_1^2 + q_2^2 - q_3^2 - q_4^2, & r &= q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 + q_4^2 \equiv q^2, \end{aligned} \quad (13)$$

所以有

$$\nabla^2 = \frac{1}{4r} \square_q - \frac{1}{4r^2} X^2. \quad (14)$$

考虑到约束条件(12)式,则(1)式对应之本征方程可化成

$$\left(-\frac{\hbar^2}{8\mu} \square_q - E q^2\right) \phi = e^2 \phi. \quad (15)$$

如令

$$4\mu = m, \quad \omega = \left(-\frac{2E}{m}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad e = e^2,$$

则(15)式可写为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \square_q + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2\right) \phi = e \phi. \quad (16)$$

此即标准四维谐振子方程,对应的‘哈密顿’量为

$$\begin{aligned} H_q &= -\frac{\hbar^2}{2m} \square_q + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \\ &= \hbar \omega \left(\sum_{\mu} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu} + 2 \right). \end{aligned} \quad (17)$$

因此有

$$e = \hbar \omega \left(\sum_{\mu} n_{\mu} + 2 \right) \equiv 2 \hbar \omega n, \quad (18)$$

式中

$$n = \frac{1}{2} \left(\sum_{\mu} n_{\mu} + 2 \right). \quad (19)$$

(18)式即给出氢原子能谱

$$E = -\frac{\mu e^4}{2 \hbar^2 n^2}. \quad (20)$$

在这样基础上,相干态最简单而方便的定义,即认为它是四维谐振子湮没算符的本征态

$$a_{\mu} |\alpha\rangle = \alpha_{\mu} |\alpha\rangle, \quad |\alpha\rangle \equiv |\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4\rangle. \quad (21)$$

但这样定义的相干态能否给出氢原子的经典运动方程是需要证明的。由(10)和(21)式,显然

$$\langle q_{\mu} \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{1}{2}} (\alpha_{\mu} + \alpha_{\mu}^*), \quad \langle \pi_{\mu} \rangle = -i \left(\frac{m\omega\hbar}{2} \right)^{\frac{1}{2}} (\alpha_{\mu} - \alpha_{\mu}^*). \quad (22)$$

而四维谐振子海森堡运动方程为

$$m \frac{dq_{\mu}}{d\sigma} = \pi_{\mu}, \quad \frac{d\pi_{\mu}}{d\sigma} = -m\omega^2 q_{\mu}, \quad (23)$$

式中 σ 为四维 q_{μ} 空间对应的时间,由于(13)式为非线性变换, σ 不同于三维 x_i 空间的时间 t 。将(23)式写在相干态表象,即得到对应经典运动方程

$$\frac{d^2}{d\sigma^2} \langle q_\mu \rangle + \omega^2 \langle q_\mu \rangle = 0. \quad (24)$$

而与 (17) 式所对应的经典‘哈密顿’量为

$$\langle H_q \rangle = \frac{m}{2} \sum_\mu \left(\frac{d\langle q_\mu \rangle}{d\sigma} \right)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle q^2 \rangle = \epsilon. \quad (25)$$

我们知道四维动量 π_μ 和三维动量 p_k 之间关系为

$$\pi_\mu = \sum_k \frac{\partial x_k}{\partial q_\mu} p_k. \quad (26)$$

在相干态表象中, 由 (26) 式可得 $d\sigma/dt = 1/r$. 在量子力学中, 时间看成是参量, 是经典数, 所以可以合理地认为

$$\frac{d\sigma}{dt} = \frac{1}{\langle r \rangle}. \quad (27)$$

在文献 [8] 中, 作为三维空间中物理时间的定义取 $\frac{d\sigma}{dt} = \frac{1}{|\langle r \rangle|}$, 其中

$$|\langle r \rangle| = \sum_\mu \langle q_\mu \rangle^2.$$

显然

$$\langle r \rangle = |\langle r \rangle| + \frac{2\hbar}{m\omega}, \quad (28)$$

在经典极限 $\hbar \rightarrow 0$ 时, 两者是一致的. 这里所以取 (27) 式, 是因为在讨论相干态中测不准关系式时, 可以得到较为简练之表达式.

应用 (24), (25) 和 (27) 式, 可以证明在经典极限下有

$$\mu \frac{d^2}{dt^2} \langle r \rangle = - \frac{e^2}{\langle r \rangle^3} \langle r \rangle. \quad (29)$$

即给出氢原子的经典开普勒方程, 所以 (21) 式定义之相干态是较合理的.

最后讨论测不准关系式, 由 (13) 和 (21) 式很容易求得

$$\langle \Delta x_1^2 \rangle \equiv \langle x_1^2 \rangle - \langle x_1 \rangle^2 = \frac{2\hbar}{m\omega} \langle r \rangle. \quad (30)$$

而

$$p_1 = \mu \frac{dx_1}{dt} = \frac{1}{2\langle r \rangle} (q_1\pi_3 + q_3\pi_1 - q_2\pi_4 - q_4\pi_2), \quad (31)$$

所以同样可计算

$$\langle \Delta p_1^2 \rangle \equiv \langle p_1^2 \rangle - \langle p_1 \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4\langle r \rangle^2} \left(\sum_\mu \alpha_\mu^* \alpha_\mu + 2 \right). \quad (32)$$

最后有

$$\langle \Delta x_1^2 \rangle \langle \Delta p_1^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \frac{\sum_\mu |\alpha_\mu|^2 + 2}{\sum_\mu |\alpha_\mu|^2 \cos^2 \phi_\mu + 1} \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad (33)$$

式中 ϕ_μ 为相干态本征值 α_μ 之幅角。在四维空间中的正则坐标和正则动量应满足像谐振子那样的最小测不准关系式,但在三维物理空间中就不一定,所以(33)式之结果并不奇怪,是合理的。

感谢张立威和宋卫东的讨论。

- [1] E. Schrödinger, *Naturwiss.*, 14(1925), 664.
- [2] P. Carruthers and M. M. Nieto, *Am. J. Phys.*, 33(1965), 537.
- [3] S. Skagerstam, *Phys. Rev.*, D19(1979), 247.
- [4] S. Fubini, *Nuovo Cimento*, 34A(1976), 521.
- [5] M. Kibler and T. Negadi, *Lett. Nuovo Cimento*, 37(1980), 225.
- [6] F. H. Cornish, *J. Phys.*, A17(1984), 323.
- [7] A. C. Chen and M. Kibler, *Phys. Rev.*, A31(1985), 3960.
- [8] C. C. Gerry, *Phys. Rev.*, A33(1986), 6.
- [9] W. Pauli, *Z. Physik*, 36(1926), 336.
- [10] J. Schwinger, *Quantum Theory of Angular Momentum*, L. C. Biedenharn and H. Van Dam Eds. Academic Press, New York, (1965), pp. 229—279.
- [11] P. Kustannheim and E. Stiefel, *J. Reine. Angew. Math.*, 218(1965), 204.

COHERENT STATES OF HYDROGEN ATOM

XU BO-WEI ZENG QI

Department of Physics, Shanghai Jiaotong University, Shanghai, 200030

(Received 7 September 1990)

ABSTRACT

From Kustannheim-Stiefel transformation, the hydrogen problem in quantum mechanics can be transformed to that of a four dimensional isotropic harmonic oscillator with constrain. The coherent states are defined, for which the expectation values of the position and the momentum are shown to give the classical Kepler orbits. The uncertainty relations for the coherent states are discussed as well.

PACC: 0365