

用 explicit Euler 方法研究含时受迫谐振子的演化及对系统循环初态的讨论^{*}

郑 懿¹⁾ 杨新娥¹⁾²⁾

¹⁾ 天津大学理学院, 天津 300072)

²⁾ 南开大学天津大学刘徽应用数学中心, 天津 300072)

(2004 年 4 月 21 日收到, 2004 年 5 月 24 日收到修改稿)

利用 Ioan Sturzu 提出的 explicit Euler 方法 (EEM) 计算了含时受迫谐振子的系统初态随时间的演化及概率分布规律, 分析了 EEM 的可行性及适用性, 并由相干态讨论了受迫谐振子系统循环初态的存在条件以及非绝热几何相.

关键词: explicit Euler 方法, 含时受迫谐振子, 循环初态, 非绝热几何相

PACC: 0365

1. 引 言

众所周知, 谐振子在量子场论, 量子光学等许多领域中有着广泛的应用. 含时量子系统的求解一直都是大家十分感兴趣的问题, 其中最令人感兴趣的是含时谐振子系统. 这是由于在任何一个物理系统中的相互作用总是随时间不断变化的, 只有用含时哈密顿量才能对一个真实的物理系统或过程给出一个准确地描述. 同时, 由于任意一个动力学系统的微小振动都可以近似地用谐振子来表示, 而一个动力学过程往往可以用一系列频率大小不等的谐振子运动来描述, 例如原子, 分子在固体表面的吸附问题^[1], 以及空腔中量子化电磁场等问题^[2,3]的研究都与含时谐振子的研究密切相关. 但对于含时谐振子, 要求解其相应的薛定谔方程是相当困难的. 首先此时已无静态能级值可言, 无法用分离变量的方法将波函数中的位置变量与时间变量分两个独立的方程求解; 其次, 经过复杂的数学变换之后, 所得的结果也仅仅是一个形式解, 因为这个解与另一个十分难解的含时非线性方程有关. 尽管如此, 多年来人们一直在做各种各样的尝试, 得到了许多处理含时薛定谔方程的方法^[4], 比较著名的有 Lewis 和 Riesenfeld^[5,6]的不变量方法, 他们提出了含时量子

系统求解的含时不变量算子理论, 找到了不变量的本征值与薛定谔方程的解之间的简单关系; 路径积分方法^[7,8]以及基于 Dyson 的 U 矩阵理论^[9]发展起来的演化算符方法. 除了以上三种较经典的方法以外, 近年来, 又有一些新的方法提出. Sturzu 提出的 Explicit Euler 方法 (EEM)^[10]就是其中之一. 本文将利用这种新的方法研究具有含时哈密顿量的量子系统. 本文利用 EEM 对含时受迫谐振子薛定谔方程进行计算, 对该方法的可行性及适用性进行分析和讨论. 利用相干态讨论受迫谐振子系统循环初态存在的条件.

1. 利用 EEM 研究含时受迫谐振子

对于一个哈密顿量含时的系统, 将系统的试探波函数取为如下的级数形式:

$$\psi(x, t) = N \exp\left[\sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n(t) x^n\right], \quad (1)$$

其中 N 为归一化系数.

把系统的势函数 $V(x, t)$ 在 $x=0$ 点处作级数展开

$$V(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} V_x^{(n)}(0, t) x^n. \quad (2)$$

系统的初态可选为

^{*} 南开大学天津大学刘徽应用数学中心资助的课题.

[†] E-mail: zysoft_1980@tom.com

$$\psi(x, 0) = N \exp\left[\sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n(0) x^n\right]. \quad (3)$$

将(2)(3)式代入薛定谔方程对比系数,则方程可用级数形式表示为

$$\begin{aligned} \dot{\alpha}_n(t) - \frac{i\hbar}{2m} \left[(n+2) \alpha_{n+1} + \sum_{k=0}^n (k+1) \alpha_{n-k+1} \right] \\ + \frac{1}{n!} V_x^{(n)}(0, t) = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

对(4)式加以分析,容易看出以下性质

当 $n > n_0$ 时,如果系统初态及系统势函数的系数 $\alpha_n(0)$ 和 $V_x^{(n)}(0, t)$ 满足 $\alpha_n(0) = 0, V_x^{(n)}(0, t) = 0$ (即系统初态及势函数作以上形式的级数展开后,仅有有限的 n_0 项),则当 $n > 2n_0 - 2$ 时, $\dot{\alpha}_n(0)$ 满足 $\dot{\alpha}_n(0) = 0$. 因此可以利用(4)式及具体的性质对 $\alpha_n(t)$ 进行解析或数值求解,从而完全确定 $\psi(x, t)$. 如果进行数值求解,则还需取出合适的时间步长 Δt , 将方程(4)转化为递推关系

$$\begin{aligned} \alpha_{n,p+1} = \alpha_{n,p} + \frac{i\hbar \Delta t}{2m} \left[(n+2) \alpha_{n+2,p} \right. \\ \left. + \sum_{k=0}^n (k+1) \alpha_{n-k+1,p} \right] \\ + \frac{1}{n!} V_x^{(n)}(0, p\Delta t). \end{aligned} \quad (5)$$

下面考虑质量为 μ , 含时频率为 $\omega(t)$ 的一维谐振子在 x 方向受到含时外力 $g(t)$ 的作用,哈密顿算符为

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega^2(t) x^2 - g(t)x, \quad (6)$$

其中 $g(t)$ 为任意时间函数.

设体系的初态为谐振子的基态,即

$$|\psi(x, 0)\rangle = N \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2\right), \quad (7)$$

其中 $\alpha = \sqrt{\mu\omega/\hbar}$, $N = \left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}\right)^{1/2}$ 为归一化因子.

利用 EEM 对此系统进行分析,将 $\psi(x, 0)$ 和 $V(x, t)$ 展为上文所给出的级数形式

$$\psi(x, 0) = N \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2\right), \quad (8)$$

$$V(x, t) = -g(t)x + \frac{1}{2} m \omega^2(t) x^2,$$

由以上性质可得出 $\psi(x, 0), V(x, t)$ 分别满足

$$\alpha_n(0) = 0 \quad (n > 2),$$

$$V_x^{(n)} = 0 \quad (n > 2) \quad (9)$$

以及

$$\dot{\alpha}_n(0) = 0 \quad (n > 2). \quad (10)$$

由 $\dot{\alpha}_n(\Delta t) = \alpha_n(0) + \dot{\alpha}_n(0)\Delta t$ (Δt 为一时间小量), 易计算出在 Δt 时刻 $\alpha_n(\Delta t)$ 仍满足

$$\alpha_n(\Delta t) = 0 \quad (n > 2). \quad (11)$$

同理,反复运用以上性质不难发现,无论重复多少次计算,即无论在什么时刻, $\alpha_n(t)$ 均满足关系

$$\alpha_n(t) = 0 \quad (n > 2). \quad (12)$$

这样的结果是我们非常乐于见到的,它表明 $t=0$ 之后的任意时刻,波函数级数仅有前三项系数 $\alpha_0(t), \alpha_1(t), \alpha_2(t)$ 不为零,其余项均始终为零.

下面,为了具体计算的方便,我们给出如下的时间函数:

$$\begin{aligned} \omega^2(t) &= \omega_0^2 \cos^2 t, \\ g(t) &= t^2 \exp(-t). \end{aligned} \quad (13)$$

这样,很容易从(4)式得到 $\alpha_0(t), \alpha_1(t), \alpha_2(t)$ 所满足的微分方程组:

$$\begin{cases} \dot{\alpha}_0(t) - \frac{i\hbar}{2\mu} [2\alpha_2(t) + \alpha_1^2(t)] + \frac{i}{\hbar} V_x(0, t) = 0, \\ \dot{\alpha}_1(t) - \frac{i\hbar}{2\mu} \alpha_1(t)\alpha_2(t) + \frac{i}{\hbar} V_x'(0, t) = 0, \\ \dot{\alpha}_2(t) - \frac{2i\hbar}{\mu} \alpha_2^2(t) + \frac{i}{2\hbar} V_x''(0, t) = 0, \end{cases} \quad (14)$$

此微分方程组的解将给出 $\psi(x, t)$ 的精确解析解. 将(8)式代入微分方程组(14)中得到

$$\begin{cases} \dot{\alpha}_0(t) - \frac{i\hbar}{2\mu} [2\alpha_2(t) + \alpha_1^2(t)] = 0, \\ \dot{\alpha}_1(t) - \frac{i\hbar}{2\mu} \alpha_1(t)\alpha_2(t) - \frac{i}{\hbar} g(t) = 0, \\ \dot{\alpha}_2(t) - \frac{2i\hbar}{\mu} \alpha_2^2(t) + \frac{i}{2\hbar} \mu \omega^2(t) = 0. \end{cases} \quad (15)$$

方程组(15)的初始条件为

$$\begin{cases} \alpha_0(0) = 0, \\ \alpha_1(0) = 0, \\ \alpha_2(0) = -\frac{1}{2} \alpha^2. \end{cases} \quad (16)$$

为了方便作图展示出系统量子态随时间的演化情况,在此我们采用文献[10]所提到的数值计算方法对以上方程组进行求解.

本文计算出不同时刻的 $\alpha_0(t), \alpha_1(t), \alpha_2(t)$ 的数值,并作出了 $|\psi(x, t)|^2$ 沿 x 轴分布随时间 t 变化的三维图像.

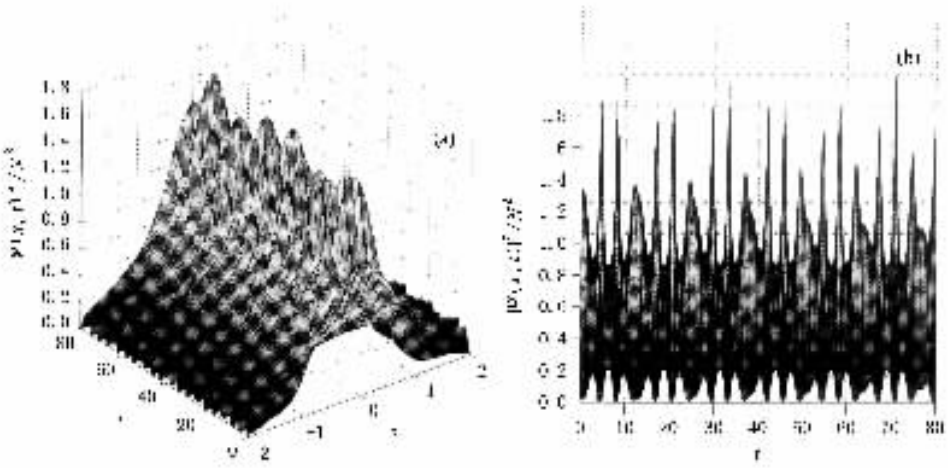


图 1 (a)(b)为频率周期性变化的自由谐振子($g(t)=0$)概率沿 x 轴分布以及随时间的演化情况

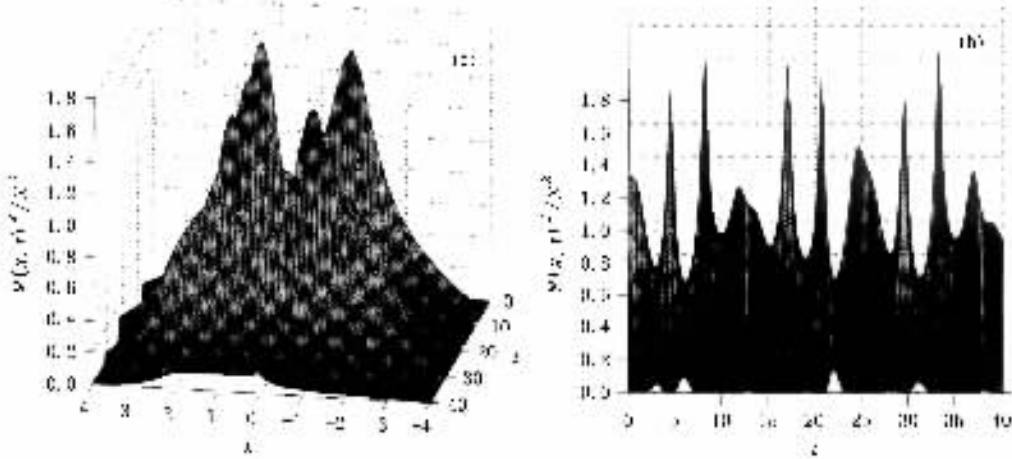


图 2 (a)(b)为频率周期变化的受迫谐振子概率沿 x 轴分布随时间的演化曲线

由图 1 和图 2 可以清晰地看到 ,当谐振子的频率作周期性变化时 ,谐振子初态随着时间作明显的周期性演化 .当谐振子不受外力作用仅是频率周期变化时 ,概率密度沿 x 轴分布的曲线形状仍保持初态时的空间对称性 ,仅是概率密度峰值及曲线横向延展度的周期性的改变 ,概率密度峰值也随时间周期性的改变 ,在一个周期内曲线出现了两个较高的主峰和一个较低的次峰 .而峰值出现的位置始终保持在 x 轴的原点处不变 ,即谐振子在原点处出现的概率始终最大 ;从图 1(b)可以很清晰地看出概率密度随时间呈周期性的变化 .而图 2(a)(b)则显示出谐振子受到 x 方向的外力作用时 ,概率密度分布曲线明显的变化 ,概率密度分布不再具有初态时的空间对称性 .这表明在外力的作用下谐振子在频率变化的一个周期内 ,出现概率最大的位置已经由原来

的坐标原点重新分布在原点两侧 .

3. 对 EEM 可行性及适用性的分析和讨论

由文献 [10] 提出的 EEM ,其主要思想是选取适当的基函数 ,将系统的波函数展开 ,同时将其时间部分和空间部分分离开来 ,将时间 t 全部归入系数中 ,最后求解关于时间 t 的常微分方程组 .从理论上讲 ,此方法应该具有普适性 .对于任何给定初态的含时系统 ,都是可解的 .但对于一般的含时体系 ,哈密顿量及初态不一定满足性质所要求的条件 ,则系统初态随时间演化时 ,就会出现级数项数的膨胀 ,导致很难得到稳定个数的常微分方程组 ,即使是做数值解有时也较为繁琐 .尽管如此 ,我们在实际计算中发

现此方法非常适用于求解含时受迫谐振子系统的演化,特别是对于势函数是 x 的多项式,或是 e 指数形式的哈密顿量,级数项数不发散,或是发散得很缓慢,因而具有很高的求解效率.更重要的是,DEM 指明了一个求解含时薛定谔方程的新方向,提示我们是不是还可以找到更多更好的完备基,使得求解含时薛定谔方程具有更高的效率.

4. 系统循环初态的存在性及非绝热几何相

本文前两节计算了系统初态随时间的演化,在这一节利用谐振子相干态来计算系统的非绝热几何相^[11,12],并对系统循环初态的存在性进行讨论.为了便于计算,我们对上文采用的含时谐振子系统稍做简化处理,令 ω 不含时,考虑如下形式的受迫谐振子其哈密顿量为

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 - g(t)x, \quad (17)$$

令

$$\begin{aligned} x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a^+ + a), \\ p &= \frac{i}{\sqrt{2}}(a^+ - a) \end{aligned} \quad (18)$$

转化为粒子数表象(采用自然单位制 $\hbar = 1$)

$$\begin{aligned} H &= \left(a^+ a + \frac{1}{2}\right)\omega - g(t)\sqrt{\frac{1}{2m\omega}}(a^+ + a) \\ &= \omega a^+ a + f(t)(a^+ + a) + \frac{1}{2}\omega, \end{aligned} \quad (19)$$

其中

$$f(t) = -g(t)\sqrt{\frac{1}{2m\omega}}. \quad (20)$$

如果将系统的初态选为标准谐振子相干态^[13]

$$|z\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} z^n (n!)^{-1/2} |n\rangle, \quad (21)$$

那么利用谐振子相干态在演化过程中保持相干态的性质^[14],可知系统的含时薛定谔方程有如下形式的解^[15]:

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\alpha(t)} |z(t)\rangle. \quad (22)$$

相干态中的参数 z 满足运动方程

$$\dot{z} = -(\omega z + f). \quad (23)$$

从上述方程解出

$$z(t) = e^{-i\omega t} \left(z(0) - i \int_0^t f(t') e^{i\omega t'} dt' \right). \quad (24)$$

在 \tilde{t} ($\tilde{t} = 2\pi/\omega$) 时刻由

$$e^{i\omega \tilde{t}} = 1 \quad (25)$$

可推出

$$z(\tilde{t}) = z(0) - i \int_0^{\tilde{t}} f(t') e^{i\omega t'} dt'. \quad (26)$$

若要系统初态 $|z\rangle$ 做循环演化,则必须要求 $z(\tilde{t}) = z(0)$,由(26)式可看出,即是要求

$$\int_0^{\tilde{t}} f(t') e^{i\omega t'} dt' = 0. \quad (27)$$

若 f 为周期函数,则可以展为傅里叶级数

$$f(t) = \sum_{n=0}^{\infty} f^{(n)} e^{in\omega t}, \quad (28)$$

f 函数的 -1 项傅里叶展开系数

$$f^{(-1)} = \frac{1}{\tilde{t}} \int_0^{\tilde{t}} f(t') e^{i\omega t'} dt'. \quad (29)$$

因此可得出结论:

当 $f^{(-1)} \neq 0$ 时,系统不存在任何形式的循环初态,进而不存在非绝热几何相位;

当 $f^{(-1)} = 0$ 时,所有的谐振子相干态均为系统的循环初态.这时可由(22)(23)式计算出系统的动力学相位为

$$\begin{aligned} \delta &= i \int_0^{\tilde{t}} \langle \psi(t) | \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle dt \\ &= \int_0^{\tilde{t}} \left(-\dot{\theta} + \omega |z|^2 + \frac{1}{2}(\bar{z}f + z\bar{f}) \right) dt, \end{aligned} \quad (30)$$

则非绝热几何相为

$$\begin{aligned} \gamma &= -\theta(\tilde{t}) - \delta \\ &= \int_0^{\tilde{t}} \left(\omega |z|^2 + \frac{1}{2}(\bar{z}f + z\bar{f}) \right) dt. \end{aligned} \quad (31)$$

下面以均匀外电场中荷电谐振子为此类系统的实例,运用以上结论进行分析.

电量为 q , 质量为 m 的谐振子在均匀外电场 ϵ 的作用下哈密顿量为如下形式:

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 - q\epsilon x, \quad (32)$$

利用(18)式变换到粒子数表象($\hbar = 1$)

$$H = \omega a^+ a + f(a^+ + a) + \frac{1}{2}\omega,$$

$$(f = -q\epsilon\sqrt{\frac{1}{2m\omega}}). \quad (33)$$

这里我们发现由于 f 不含时, 则

$$\int_0^{\tilde{t}} f(t') e^{i\omega t'} dt' \equiv 0, \quad (34)$$

因此所有的谐振子相干态均可作为系统的循环初态.

选取相干态 $\psi(x - x_0)$ 其中 $x_0 = \sqrt{\frac{1}{m\omega}}$ 即 $z =$

$\frac{1}{\sqrt{2}}$ 作为系统的初态, 由 (31) 式可计算出非绝热几何相

$$\begin{aligned} \gamma &= \int_0^{\tilde{t}} \left(\omega |z|^2 + \frac{1}{2}(\dot{z}f + \dot{z}f) \right) dt \\ &= \pi \left(1 - \frac{q\epsilon}{\omega} \sqrt{\frac{1}{8m\omega}} \right). \end{aligned} \quad (35)$$

若外电场 $\epsilon \rightarrow 0$ 则系统退化为标准谐振子, 此时的非绝热几何相为

$$\gamma = \begin{cases} 0 & (z = 0 \quad \text{定态}), \\ \pi & (z = 1/\sqrt{2} \quad \text{完全非定态}). \end{cases} \quad (36)$$

若外电场随时间变化, 例如 $\epsilon = \epsilon_0 \sin \omega t$, 此时

$$\begin{aligned} f^{l-1} &= \frac{1}{\tilde{t}} \int_0^{\tilde{t}} f(t') e^{i\omega t'} dt' \\ &= \frac{q\epsilon}{\tilde{t}} \int_0^{\tilde{t}} \sin \omega t' e^{i\omega t'} dt' \neq 0. \end{aligned} \quad (37)$$

则这个系统不存在循环初态, 也就没有非绝热几何相位.

5. 结 论

综上所述, 我们可以得出结论, 对于受迫谐振子系统来说, 其循环初态及非绝热几何相的存在与否完全由系统受迫项的傅里叶展开的 -1 项系数 f^{l-1} 决定. 若 $f^{l-1} = 0$, 则所有的谐振子相干态均可作为此系统的循环初态; 若 $f^{l-1} \neq 0$, 则此系统不存在任何形式的循环初态, 也就谈不上非绝热几何相计算. 上述结论可作为计算受迫谐振子系统非绝热几何相之前的一个判别标准. 如果不满足该标准的要求, 则没有必要继续下去, 可避免许多无用的计算.

- [1] Oh H G. 1989 *Phys. Rev. A*, **40** 45
 [2] Colegrave R K and Abdalla M S 1981 *Opt. Acta*, **28** 495
 [3] Qian S W, Gu Z Y and Wang W 1991 *Phys. Lett. A* **157** 456
 Abdalla M S and Colegrave R K 1993 *Phys. Rev. A* **48** 1562
 [4] Li B Z and Li L 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1654 (in Chinese)
 [李伯臧、李 玲 2001 物理学报 **50** 1654]
 [5] Lewis H R 1968 *J. Math. Phys.* **9** 1976
 [6] Lewis H R and Riesenfeld W B 1969 *J. Math. Phys.* (10) 1458
 [7] Khandekar D C and Lauwande S V 1975 *J. Math. Phys.* (16) 384
 [8] Ling R L and Feng J F 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1421 (in Chinese)

- [凌瑞良、冯金福 2001 物理学报 **50** 1421]
 [9] Dyson F J 1949 *Phys. Rev.* **75** 486
 [10] Ioan Sturzu 2001 *Phys. Rev. A* **64** 054101
 [11] Liu D Y 1999 *Chin. Phys.* **8** 1
 [12] Liu D Y 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 1233 (in Chinese)
 [刘登云 1998 物理学报 **47** 1233]
 [13] Perelomov A M 1986 *Generalised Coherent States and The Applications* (Springer)
 [14] Glauber R J 1966 *Phys. Lett.* **21** 650
 [15] Moore D J 1991 *Phys. Reports.* **210** 1

Solution of time-dependent harmonic oscillator system using explicit Euler method and discussion of the cyclic initial states ^{*}

Zheng Yi¹⁾ Yang Xin-E^{1 2)}

¹⁾*Department of Applied Physics, School of Science, Tianjin University, Tianjin 300072, China*

²⁾*LiuHui Center of Applied Mathematics, Nankai University and Tianjin University, Tianjin 300072, China*

(Received 21 April 2004; revised manuscript received 24 May 2004)

Abstract

The Schrödinger equation of forced time-dependent harmonic oscillator is solved by using the explicit Euler method. The result of evolution of the initial state is given, the feasibility and applicability of explicit Euler method are discussed. Using coherent state, the non-adiabatic berry phase and the cyclic initial states of the system are discussed.

Keywords : explicit Euler method, time-dependent harmonic oscillator, cyclic initial state, non-adiabatic berry phase

PACC : 0365

* Project supported by the LiuHui Center for Applied Mathematics, Nankai University and Tianjin University.