第 45 卷 第 5 期 1996 年 5 月
1000-3290/96/45(05)/0729-09

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 45, No. 5, May, 1996

质谱仪中带电粒子运动的双波描述*

黄湘友

(北京大学物理系,北京 100871)

(1994 年 12 月 12 日收到)

一个已知能量的带电粒子在质谱仪中于何时何地进入和离开磁场,如何用量子力学来计算是个很有意思的问题.这一体系的双波描述给出类似于经典力学的结果,但粒子能量取量子化分立值.

PACC: 0365; 0250

1 引 言

一个波函数可以描述单个粒子或者认为它只能描述系综仍是个议而未决的问题[1].近年来量子力学的经典极限研究有力地支持后一种观点[2—6].这一点本文的最后还有说明.考察一个具某一能量带电粒子在质谱仪中的运动.这粒子于何时何地进入和离开磁场?传统量子力学对这一问题无法回答.即使对质量和动能都很大的准经典粒子,用普通的量子力学方法也无法回答.原因是一个波函数包含的信息量太少,它不足以完整回答单个粒子的运动问题.双波量子理论就是为了弥补传统量子力学的这一缺欠而提出来的.双波理论假设单个粒子的状态由满足同一个薛定谔方程的两个波函数共同表示,这样就克服了一个波函数信息量不够的困难.这一假设已很好地应用于自由粒子[7],束缚体系[8,9],转子和自旋[10,11],均匀电场和磁场中带电粒子的运动[12,13],散射[14],跃迁[15]以及量子光学[16—20].本文用双波理论处理质谱仪中带电粒子的运动.通过本工作将对双波理论的必要性和特点有更进一步的认识.

2 双波解

设带电粒子沿 y 轴方向入射,质谱仪中的均匀磁场安置在 $y\geqslant 0$ 的空间区域,磁感应强度为 $B(B>0)$ 且指向 z 方向.取 Landau 规范,令矢势 $(A_1, A_2) = (-By, 0)$,则这二维体系的哈密顿量为

$$H = \begin{cases} \dfrac{1}{2m}(P_1^2 + P_2^2), & y < 0, \\ \dfrac{1}{2m}[(P_1 + qBy)^2 + P_2^2], & y \geqslant 0. \end{cases} \tag{1}$$

*国家自然科学基金资助的课题.

由 $y \geqslant 0$ 区域的 Landau 解可写出这体系的定态波函数

$$\psi_{nk_1}(x,y) = \begin{cases} e^{ik_1x}[A(n,k_1)e^{ik_2(n,k_1)y} + \text{c.c.}], & y < 0, \\ e^{ik_1x}e^{-\xi^2/2}H_n(\xi), & y \geqslant 0, \end{cases} \tag{2}$$

式中 $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(y + \frac{\hbar k}{qB})$. 能量本征值 $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, 且 $\omega = \frac{|q|B}{m}$. q、m 为粒子的电荷和质量. $k_2 = k_2(n,k_1) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE_n - \hbar^2 k_1^2}$. 系数 A 由连续性条件 $\psi(x,0^-) = \psi(x,0^+)$ 及 $\frac{\partial\psi}{\partial y}\Big|_{y=0^-} = \frac{\partial\psi}{\partial y}\Big|_{y=0^-}$ 定出

$$A(n,k_1) = \frac{1}{2}e^{-\xi_0^2}\left[H_n(\xi_0) - i\frac{\sqrt{m\hbar\omega}}{\sqrt{2mE_n - \hbar^2k_1^2}}(-\xi_0 H_n(\xi_0) + 2nH_{n-1}(\xi_0))\right], \tag{3}$$

式中 $\xi_0 = \frac{qk_1}{|q|}\sqrt{\frac{\hbar}{|q|B}}$.

对一个平行于 y 轴入射的带电粒子, 双波理论假设其状态由下面两个波函数 ψ_{n0} 和 φ 共同表示[7]

$$\psi_{n0}(x,y,t) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{io(x-x_0)}\left[\frac{A(n,0)}{|A(n,0)|}e^{ik_2(n,0)y} + \text{c.c.}\right]^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}, & y < 0, \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{|A(n,0)|}e^{io(x-x_0)}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}y^2}H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}y)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}, & y \geqslant 0, \end{cases} \tag{4}$$

$$\varphi(x,y,t) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dk_1\sum_{n'=0}^{\infty}e^{ik_1(x-x_0)}\left[\frac{A(n',k_1)}{|A(n',k_1)|}e^{ik_2(n',k_1)y} + \text{c.c.}\right]e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n'}(t-t_0)}, & y < 0, \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dk_1\sum_{n'=0}^{\infty}\frac{1}{|A(n',k_1)|}e^{ik_1(x-x_0)}e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_{n'}(\xi)e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n'}(t-t_0)}, & y \geqslant 0, \end{cases} \tag{5}$$

式中 x_0 和 t_0 为本理论中引进的实参数.

设粒子在负 y 方向限制在距离 L_2 之内, L_2 是个较大的宏观尺度. 令 $D = \text{Re}\int_{-\infty}^{+\infty}dx\int_{-L_2}^{\infty}dy\varphi^*\psi_{n0}$, 因为 φ 和 ψ_{n0} 都是薛定谔方程的解, D 是个与时间无关的常数. 本文无须将这一常数具体算出. 双波理论还假设这粒子的力学量 f 在 t 时刻的测量值为

$$< f(t) > = \frac{1}{D}\text{Re}\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-L_2}^{\infty}dy\varphi^*(x,y,t)\hat{f}\psi_{n0}(x,y,t), \tag{6}$$

式中 $\hat{f}$ 是力学量 f 的厄密算符.

在(6)式中令 $\hat{f} = \hat{H}$ 和 $\hat{f} = \hat{P}_1$, 我们立即得到粒子的能量和动量分量值

$$< E > = \frac{1}{D}\text{Re}\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-L_2}^{\infty}dy\varphi^*(x,y,t)\hat{H}\psi_{n0}(x,y,t) = E_n. \tag{7}$$

$$< P_1 > = \frac{1}{D}\text{Re}\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-L_2}^{\infty}dy\varphi^*(x,y,t)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi_{n0}(x,y,t) = 0. \tag{8}$$

(8)式表明在 $y<0$ 的自由空间中,粒子平行于 y 轴运动.其他力学量的计算在下节进行.

3 轨 迹

轨迹即是粒子波包质心位置随时间的变化.普通量子力学中波包位置平均值也有意义.但量子力学拒绝任一时刻粒子有确定位置和动量的轨道概念,这一点后面还要提到.微观带电粒子在质谱仪中作宏观尺度的运动.我们将看到 $\mathrm{Re}\varphi^*(x,y,t)\psi_{n0}(x,y,t)$ 是个很小的波包,这波包像经典粒子一样在质谱仪中运动.本节计算这波包的运动轨迹.先考虑大量子数 n 的情形.

(a) 在(6)式中令 $\hat{f}=y$,有

$$\begin{aligned}<y(t)> &= \mathrm{Re}\frac{1}{D}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\int_{-L_2}^{\infty}\mathrm{d}y\varphi^*(x,y,t)y\psi_{n0}(x,y,t)\\ &= \mathrm{Re}\frac{1}{2\pi D}\int_{-L_2}^{\infty}y\mathrm{d}y\sum_{n'=n-\Delta n}^{n+\Delta n}\left[\frac{A^*(n',0)A(n,0)}{|A(n',0)A(n,0)|}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k_2(n',0)-k_2(n,0))y}\right.\\ &\quad\left.+\mathrm{c.c.}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)\omega(t-t_0)}\\ &\quad+\mathrm{Re}\frac{1}{2\pi D}\int_0^{+\infty}y\mathrm{d}y\sum_{n'=n-\Delta n}^{n+\Delta n}\frac{1}{|A(n',0)|N_{n'}|A(n,0)|N_n}\\ &\quad\times\psi_{n'}^*(y)\psi_n(y)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)\omega(t-t_0)},\end{aligned}\tag{9}$$

式中 $\psi_n(y)=N_n\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}y^2}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}y\right)$ 为归一化简谐振子波函数,$N_n=\left(\frac{\sqrt{m\omega}}{\sqrt{\pi\hbar}2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}}$. n' 的求和限制在 $(n-\Delta n,n+\Delta n)$ 范围,Δn 为适当大的整数.因为 $\psi_{n'}$ 和 ψ_n 都是 y 的振荡函数,它们之间的相关度随 $|n'-n|$ 的增加而迅速减小,(9)式中对 n' 的求和限制在适当范围就足够精确.

由(3)式知 $A(n,0)=\frac{1}{2}\left[H_n(0)-\mathrm{i}\frac{2n}{\sqrt{2n+1}}H_{n-1}(0)\right]$,注意到 $H_{2m}(0)=(-1)^m\frac{(2m)!}{m!}$, $H_{2m+1}(0)=0$,得到任意整数 n 的结果

$$\frac{A(n,0)}{|A(n,0)|}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\frac{\pi}{2}}.\tag{10}$$

应用 n 大时的斯特令公式 $n!=n^n\mathrm{e}^{-n}\sqrt{2\pi n}$,有

$$\frac{1}{|A(n,0)|N_n|A(n',0)|N_{n'}}=(nn')^{\frac{1}{4}}2\pi\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}.\tag{11}$$

应用 n 大时 $\psi_n(y)$ 的 WKB 解

$$\psi_n(y)=\frac{|A|}{\sqrt{P(E_n,y)}}\cos\left[\int_{y_1}^{y}\frac{P(E_n,y)}{\hbar}\mathrm{d}y-\frac{\pi}{4}\right].\tag{12}$$

式中 $P(E_n,y)=\sqrt{2m(E_n-\frac{1}{2}m\omega^2y^2)}$, $y_1=\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E_n}{m}}$ 为粒子在势场 $V(y)=\frac{1}{2}m\omega^2y^2$

中的右返折点,归一化常数 $|A| = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi}}$. 于是(9)式为

$$< y(t) > = \mathrm{Re}\,\frac{1}{2\pi D}\int_{-L_2}^{\infty} y\mathrm{d}y \sum_{n'=n-\Delta n}^{n+\Delta n} [\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)\frac{\pi}{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k_2(n',0)-k_2(n,0))y} + \mathrm{c.c.}]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)\omega(t-t_0)}$$

$$+ \mathrm{Re}\,\frac{1}{2\pi D}\int_0^{\infty} y\mathrm{d}y \sum_{n'=n-\Delta n}^{n+\Delta n} \frac{(nn')^{\frac{1}{4}}\sqrt{2m\hbar\omega}}{\sqrt{P(E_{n'},y)P(E_n,y)}}$$

$$\times \cos\left[\int_{y_1}^{y} \frac{P(E_{n'},y) - P(E_n,y)}{\hbar}\mathrm{d}y\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)\omega(t-t_0)}. \quad (13)$$

因为 $P(E_n, y)|_{y_1} = 0$,余弦函数中的积分下限都统一写成 y_1, $k_2(n',0)$ 和 $P(E_{n'}, y)$ 都是 n' 的缓变函数,在 n' 求和范围内将它们展开

$$k_2(n',0) - k_2(n,0) = (n'-n)\frac{\partial k_2}{\partial n} = (n'-n)\frac{m\omega}{\sqrt{2mE_n}} = (n'-n)\frac{\omega}{v_n}. \quad (14)$$

$$P(E_{n'},y) - P(E_n,y) = (E_{n'} - E_n)\frac{\partial P}{\partial E_n} = (n'-n)\frac{m\hbar\omega}{\sqrt{2m(E_n - \frac{1}{2}m\omega^2y^2)}}. \quad (15)$$

将展开式(14)和(15)式代入(13)式得

$$< y(t) > = \mathrm{Re}\,\frac{1}{2\pi D}\int_{-L_2}^{0} y\mathrm{d}y \sum_{n'=n-\Delta n}^{n+\Delta n} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)(\omega t - \omega t_0 + \frac{\pi}{2} - \frac{\omega}{v_n}y)}$$

$$+ \mathrm{Re}\,\frac{1}{2\pi D}\int_{-L_2}^{0} y\mathrm{d}y \sum_{n'=n-\Delta n}^{n+\Delta n} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)(\omega t - \omega t_0 - \frac{\pi}{2} + \frac{\omega}{v_n}y)}$$

$$+ \mathrm{Re}\,\frac{1}{2\pi D}\int_0^{\infty} y\mathrm{d}y \sum_{n'=n8-\Delta n}^{n+\Delta n} \frac{(nn')^{\frac{1}{4}}\sqrt{2m\hbar\omega}}{\sqrt{P(E_{n'},y)P(E_n,y)}}\,\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)(\cos^{-1}\frac{y}{y_1} - \omega t + \omega t_0)}$$

$$+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)(\cos^{-1}\frac{y}{y_1} + \omega t - \omega t_0)}). \quad (16)$$

上式中每一项的积分贡献都来自相位因子为零的点的一个小邻域. 例如第三项中的这一点是 $y = y_1\cos[\pm\omega(t - t_0)] = y_1\cos\omega(t - t_0)$. 在相同的近似下 D 可以写成

$$D = \mathrm{Re}\,\frac{1}{2\pi}\int_{-L_2}^{0} \mathrm{d}y \sum_{n'=n-\Delta n}^{n+\Delta n} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)(\omega t - \omega t_0 + \frac{\pi}{2} - \frac{\omega}{v_n}y)} + \mathrm{Re}\,\frac{1}{2\pi}\int_{-L_2}^{0} \mathrm{d}y \sum_{n'=n-\Delta n}^{n+\Delta n} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)(\omega t - \omega t_0 - \frac{\pi}{2} + \frac{\omega}{v_n}y)}$$

$$+ \mathrm{Re}\,\frac{1}{2\pi}\int_0^{\infty} \mathrm{d}y \sum_{n'=n-\Delta n}^{n+\Delta n} \frac{(nn')^{\frac{1}{4}}\sqrt{2m\hbar\omega}}{\sqrt{p(E_{n'},y)P(E_n,y)}}$$

$$\times \frac{1}{2}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)(\cos^{-1}\frac{y}{y_1} - \omega t + \omega t_0)} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)(\cos^{-1}\frac{y}{y_1} + \omega t - \omega t_0)}). \quad (17)$$

由(16)和(17)式得

$$< y(t) > = \begin{cases} v_n(t - t_0 + \frac{\pi}{2\omega}), & t < t_0 - \frac{\pi}{2\omega}, \\ -v_n(t - t_0 - \frac{\pi}{2\omega}), & t > t_0 + \frac{\pi}{2\omega}, \\ \frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E_n}{m}}\cos\omega(t - t_0), & t_0 - \frac{\pi}{2\omega} < t < t_0 + \frac{\pi}{2\omega}. \end{cases} \quad (18)$$

当在(17)式第三项中令 n' 取中值 n 并将变数 $\cos^{-1}\frac{y}{y_1}$ 换成新变数 $\frac{\omega}{v_n}\eta$，则第三项与前两项有相同的表达式，表明在这近似下 D 仍是个常数.(18)式表明，当 $t < t_0 - \frac{\pi}{2\omega}$ 时粒子由远处向磁场运动，保持 $< y(t) > < 0$.当 $t > t_0 + \frac{\pi}{2\omega}$ 时粒子离开磁场向远处运动，也保持 $< y(t) > < 0$.当 $t_0 - \frac{\pi}{2\omega} < t < t_0 + \frac{\pi}{2\omega}$ 时，粒子处在磁场区域保持 $< y(t) > > 0$.

若在(6)式中令 $\hat{f} = y^2$，从计算中可看出有结果 $< y^2(t) > = < y(t) >^2$.

(b) 在(6)式中令 $\hat{f} = x - x_0$，有

$$
\begin{aligned}
< (x - x_0) > = &\operatorname{Re}\frac{1}{4\pi^2 D}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k_1\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\int_{-L_2}^{0}\mathrm{d}y\sum_{n'}\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial k_1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1(x-x_0)}\right)\\
&\times\left[\frac{A^*(n',k_1)A(n,0)}{|A(n',k_1)A(n,0)|}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k_2(n',k_1)-k_2(n,0))y} + \mathrm{c.c.}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)\omega(t-t_0)}\\
&+\operatorname{Re}\frac{1}{4\pi^2 D}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k_1\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\int_{0}^{\infty}\mathrm{d}y\sum_{n'}\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial k_1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1(x-x_0)}\right)\\
&\times\frac{1}{|A(n',k_1)A(n,0)|}\mathrm{e}^{-\xi^2/2}H_{n'}(\xi)\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}y^2}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}y\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)\omega(t-t_0)}\\
= &-\operatorname{Re}\frac{1}{2\pi D}\int_{-L_2}^{0}\mathrm{d}y\sum_{n'}\mathrm{i}\left[\frac{\partial}{\partial k_1}\frac{A^*(n',k_1)A(n,0)}{|A(n',k_1)A(n,0)|}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k_2(n',0)-k_2(n,0))y}\right.\\
&\left.+\mathrm{c.c.}\right]_{k_1=0}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)\omega(t-t_0)}\\
&-\operatorname{Re}\frac{1}{2\pi D}\int_{0}^{\infty}\mathrm{d}y\sum_{n'}\frac{1}{|A(n',0)A(n,0)|}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}y^2}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}y\right)\\
&\times\mathrm{i}\left[\frac{\partial}{\partial k_1}\mathrm{e}^{-\xi^2/2}H_{n'}(\xi)\right]_{k_1=0}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)\omega(t-t_0)}.
\end{aligned}
$$

式中已对 k_1 分部积分和对 x 积分并利用了结果 $\frac{\partial}{\partial k_1}k_2(n,k_1)\Big|_{k_1=0} = 0$ 及 $\frac{\partial}{\partial k_1}\Big|A(n,k_1)\Big|_{k_1=0} = 0$.注意到 $\frac{\partial}{\partial k_1}\frac{A(n',k_1)}{|A(n',k_1)|} = \mathrm{i}\frac{\sqrt{2mE_{n'}}}{qB}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n'\frac{\pi}{2}}$ 以及 $\frac{\partial}{\partial k_1}\mathrm{e}^{-\xi^2/2}H_{n'}(\xi)\Big|_{k_1=0} = \frac{\hbar}{qB}\frac{\partial}{\partial y}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}y^2}H_{n'}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}y\right)$，利用 $k_2(n',0)$ 的展开(14)式和 $\frac{A(n,0)}{|A(n,0)|}$ 的结果(10)式，则上式可写为

$$
\begin{aligned}
< (x - x_0) > = &-\operatorname{Re}\frac{1}{2\pi D}\int_{-L_2}^{0}\mathrm{d}y\sum_{n'=n-\Delta n}^{n+\Delta n}\frac{\sqrt{2mE_{n'}}}{qB}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)(\omega t-\omega t_0+\frac{\pi}{2}-\frac{\omega}{v_n}y)}\right.\\
&\left.-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)(\omega t-\omega t_0-\frac{\pi}{2}+\frac{\omega}{v_n}y)}\right)\\
&-\frac{1}{qB}\operatorname{Re}\frac{1}{2\pi D}\int_{0}^{\infty}\mathrm{d}y\sum_{n'=n-\Delta n}^{n+\Delta n}\frac{1}{|A(n',0)|N_{n'}|A(n,0)|N_n}
\end{aligned}
$$

$$\times \psi_n(y)\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi_{n'}(y)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)\omega(t-t_0)}. \tag{19}$$

第一大项中的$\sqrt{2mE_{n'}}$是n'的缓变函数,按中值定理取一中间值提出求和号外,余下的因子按照求(18)式的近似归一化为1.第二项分部积分后实际上是$<P_2(t)>$的定义式.后面将看到$<P_2>=m\frac{\mathrm{d}<y>}{\mathrm{d}t}$,而$<y>$由(18)式中$(t_0-\frac{\pi}{2\omega})<t<(t_0+\frac{\pi}{2\omega})$时的表示式给出.于是由(19)式得出

$$<x(t)>-x_0=\begin{cases}-\sqrt{2mE_n}/qB, & t<t_0-\frac{\pi}{2\omega},\\ \sqrt{2mE_n}/qB, & t>t_0+\frac{\pi}{2\omega},\\ \frac{\sqrt{2mE_n}}{qB}\sin\omega(t-t_0), & (t_0-\frac{\pi}{2\omega})<t<(t_0+\frac{\pi}{2\omega}).\end{cases} \tag{20}$$

由(18)和(20)式可知,粒子以速率v_n沿y轴方向入射,于时刻$t=t_0-\frac{\pi}{2\omega}$在坐标点$\left(x_0-\frac{\sqrt{2mE_n}}{qB},0\right)$进入磁场.在磁场区作半径为$\frac{\sqrt{2mE_n}}{|q|B}$的圆周运动,然后于时刻$t=t_0+\frac{\pi}{2\omega}$在坐标点$\left(x_0+\frac{\sqrt{2mE_n}}{qB},0\right)$离开磁场并以速率$v_n$平行$y$轴朝远处运动.

(c) 当n不是很大时我们考察粒子在$y<0$区域中的运动.由(4),(5)和(6)式计算力学量x^l $(l=1,2)$的值

$$<x^l>=\mathrm{Re}\frac{1}{4\pi^2D}\int_{-\infty}^{\infty}x^l\mathrm{d}x\int_{-L_2}^{0}\mathrm{d}y\int_{-\Delta K}^{\Delta K}\mathrm{d}k_1\sum_{n'=0}^{n+\Delta n}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1(x-x_0)}$$
$$\times\left[\frac{A^*(n',k_1)A(n,0)}{|A(n',k_1)A(n,0)|}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k_2(n',k_1)-k_2(n,0))y}+\mathrm{c.c.}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)\omega(t-t_0)}. \tag{21}$$

因为$\psi_{n'k_1}$和ψ_{n0}之间的相关度随$|k_1|$和$|n'-n|$的增加而迅速减小,对k_1和n'的求和限制在适当范围就足够精确.将(21)式中的被积函数展开到k_1的一阶项,由(3)式可求得

$$A(n,k_1)=A(n,0)\left(1+\mathrm{i}\frac{\sqrt{2mE_n}}{qB}k_1\right)\text{ 或 }\frac{A(n,k_1)}{|A(n,k_1)|}=\frac{A(n,0)}{|A(n,0)|}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\sqrt{2mE_n}}{qB}}. \tag{22}$$

注意到(10)和(14)式由(21)式得

$$<x^l>=\mathrm{Re}\frac{1}{4\pi^2D}\int_{-\infty}^{\infty}x^l\mathrm{d}x\int_{-L_2}^{0}\mathrm{d}y\sum_{n'=0}^{n+\Delta n}\int_{-\Delta K}^{\Delta K}\mathrm{d}k_1\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1(x-x_0+\frac{\sqrt{2mE_{n'}}}{qB})}\right.$$
$$\times\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)(\omega t-\omega t_0+\frac{\pi}{2}-\frac{\omega}{v_n}y)}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1(x-x_0-\frac{\sqrt{2mE_{n'}}}{qB})}\left.\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)(\omega t-\omega t_0-\frac{\pi}{2}+\frac{\omega}{v_n}y)}\right]$$
$$=\mathrm{Re}\frac{1}{2\pi D}\int_{-L_2}^{0}\mathrm{d}y\sum_{n'=0}^{n+\Delta n}\left[\left(x_0-\frac{\sqrt{2mE_{n'}}}{qB}\right)^l\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)(\omega t-\omega t_0+\frac{\pi}{2}-\frac{\omega}{v_n}y)}\right.$$
$$\left.+\left(x_0+\frac{\sqrt{2mE_{n'}}}{qB}\right)^l\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n'-n)(\omega t-\omega t_0-\frac{\pi}{2}+\frac{\omega}{v_n}y)}\right]$$

$$=\begin{cases}\left(x_0-\dfrac{\sqrt{2mE_n}}{qB}\right)^l, & t<t_0-\dfrac{\pi}{2\omega},\\ \left(x_0+\dfrac{\sqrt{2mE_n}}{qB}\right)^l, & t>t_0-\dfrac{\pi}{2\omega}.\end{cases} \tag{23}$$

计算中省略了对 k_1 积分得到 x 的 δ 型函数中间步骤.最后一步用了中值定理和(18)式中所用的近似.

对力学量 $y^l(l=1,2)$ 也可作类似的计算,结果与(18)式相同.从计算中可看出 $\mathrm{Re}\varphi^*(x,y,t)\psi_{n0}(x,y,t)$ 对 n 的各种值在 $y<0$ 区域中都是个很小的波包,这波包像经典粒子一样运动.

(d) 当 n 不很大时粒子在 $y>0$ 区域的运动可用 Ehrenfest 定理计算.因为在 $y<0$ 区域的入射端和出射端, $\mathrm{Re}\varphi^*\psi_{n0}$ 都是个小波包.由于波函数的连续性, $\mathrm{Re}\varphi^*\psi_{n0}$ 在 $y>0$ 区域中也应是个小波包.由(6)式同样可推得算符方程 $\frac{\mathrm{d}\hat{f}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{f},\hat{H}]$.由这方程可得 $y>0$ 区域中的关系式

$$\frac{\mathrm{d}^2\hat{x}}{\mathrm{d}t^2}=\frac{q}{|q|}\omega\frac{\mathrm{d}\hat{y}}{\mathrm{d}t}. \tag{24}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\hat{y}}{\mathrm{d}t^2}=-\frac{q}{|q|}\omega\frac{\mathrm{d}\hat{x}}{\mathrm{d}t}. \tag{25}$$

双波理论中的通解 $<x(t)>=x_0+\frac{q}{|q|}A\sin(\omega t-\theta_0)$ 和 $<y(t)>=y_0+A\cos(\omega t-\theta_0)$.由 $y=0$ 处的连续性条件和(18)、(23)式得时间 $t_0-\frac{\pi}{2\omega}<t<t_0+\frac{\pi}{2\omega}$ 内粒子在 $y>0$ 区域内的运动为

$$<x(t)>=x_0+\frac{\sqrt{2mE_n}}{qB}\sin\omega(t-t_0). \tag{26}$$

$$<y(t)>=\frac{\sqrt{2mE_n}}{|q|B}\cos\omega(t-t_0). \tag{27}$$

总之,由(18)和(20)式表示的运动对大、小量子数 n 都适用.

4 讨　论

通过对质谱仪中单个带电粒子运动的双波描述可看出这一描述的若干特点.

1. 粒子的运动轨迹和经典结果一样,但能量取量子化分立值.另外,轨道概念在双波理论中有意义.例如在 $y<0$ 区域,由算符方程 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\gamma}}{\mathrm{d}t}=\frac{\boldsymbol{P}}{m}$ 可算得 $<P_1(t)>=m\frac{\mathrm{d}<x>}{\mathrm{d}t}$, $<P_2(t)>=m\frac{\mathrm{d}<y>}{\mathrm{d}t}$, $<x>$ 和 $<y>$ 由(18)和(20)式的相应时间区给出.其实通常的量子力学中也有类似的关系,只是由于 x 和 P 间有不确定关系才必须抛弃轨道概念.在双波理论中不确定关系不成立.一方面有

$\Delta P_1 = \Delta P_2 = 0$，$P_1$ 算符有零本征值，$< P_2 > = \pm\sqrt{\frac{2E_n}{m}}$ 且 $< \frac{P_2^2}{2m} > = E_n$ 为粒子动能本征值. 另一方面在 $y < 0$ 区域有 $\Delta x = \Delta y = 0$.

2. 双波理论具有定域和非定域的双重性. 一方面波函数 ψ_{n0} 在很大的空间范围内都不衰减. 远处的一个带电粒子能感知 $y > 0$ 区域内有磁场存在，因而其定态解取(2)式且能量取分立本征值. 远处边界条件的变动将影响方程的解，从而影响粒子的运动. 另一方面由于公式(6)和 φ 波的作用，双波理论又具有定域性. 任一时刻只有空间一个点附近的小区域内的双波才对力学量的积分有贡献. 我们只在一个很小的区域内能记录到粒子的存在. 双波理论中这种非定域性和定域性的双重特点正是单个粒子波粒二象性的体现.

3. 定义力学量对参数 x_0 和 t_0 的平均值

$$\bar{f} = \lim_{\substack{L_1\to\infty \\ T\to\infty}} \frac{1}{L_1 T}\int_{-\frac{L_1}{2}}^{\frac{L_1}{2}} dx_0 \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt_0 < f(t) >. \tag{28}$$

将(4)，(5)和(6)式代入(28)式得

$$\bar{f} = \lim_{L_1\to\infty} \frac{1}{L_1 D}\int_{-\frac{L_1}{2}}^{\frac{L_1}{2}} dx \int_{-L_2}^{\infty} dy\, \psi_{n0}^*(x,y)\hat{f}\psi_{n0}(x,y). \tag{29}$$

这是量子力学里状态 $|\psi_{n0}\rangle$ 中力学量的平均值公式. 在双波理论看来，一个波函数 $\psi_{n0}(x,y)$ 描述一个系综. 系综中粒子的能量信息 E_n 和动量 P_1 本征值为零，即 $y < 0$ 区域中平行 y 轴运动的信息被保留，但粒子到达和离开磁场的位置和时间信息被平均掉了. 对(29)式，不确定关系有效. 不确定关系不属于单个粒子而是属于系综的性质[7]. 在 $y < 0$ 的区域 ψ_{n0} 是入射波和出射波的叠加，量子力学能告知测 P_2 时得到 $\pm\sqrt{2mE_n}$ 的几率各为$\frac{1}{2}$. 这中间要用到波函数的坍缩假设，即测量 P_2 时 ψ_{n0} 要突然坍缩到入射波或出射波. 为了说明几率的来源，还要把一种不可控制的干扰与仪器和观测者相联系. 至于为什么不可控制的干扰每次只影响 $< P_2 >$ 的正、负而不影响其数值，量子力学无法奉告. 实际上(29)式中缺少粒子到达磁场区域的时间信息. 双波理论认为，在 $t_0 - \frac{\pi}{2\omega}$ 以前测量 P_2 肯定得 $< P_2 > = \sqrt{2mE_n}$，在 $t_0 + \frac{\pi}{2\omega}$ 以后测 P_2 肯定得 $< P_2 > = -\sqrt{2mE_n}$.

4. 如果单就轨迹而言，量子力学也可以进行计算. 它可以构造一个小波包，然后可算出波包的中心作类似于经典粒子的运动. 但构造波包需要牺牲动量和动能方面的信息. 波包越小，这种信息损失就越大. 即使对质量和动能都很大的准经典粒子，这种状况也不会改善. 具体地说，一个由加速器出来已知动能的经典粒子，用波函数方法无法计算它的轨迹. 这是由于一个波函数的信息量不足以描述单个粒子所致. 近年来量子力学经典极限的研究一方面注意到不能仅令普朗克常数 $\hbar\to 0$ 作为极限手续，只有当含 $\hbar$ 的项与其他项相比小到可忽略时才可对它使用 $\hbar\to 0$[5,6]. 另一方面也逐渐对一个波函数不能描述单个粒子有所认识. 一个波函数实质上提供粒子系综的统计信息[2]. 大量子数条件下量子力学可过渡到经典力学的说法不成立[3]. 大量子数是向经典力学过渡的必要但不是充分条件[4]. 量子力学的经典极限不是经典力学而是统计力学[5]. 在 WKB 近似下一个波函数只

能描述系综[6].质谱仪中带电粒子的双波描述一方面在统计平均下与量子力学的结果一致,另一方面这一描述又与经典描述完全兼容.

作者感谢田旭同志在这方面的共同讨论.

[1] L.E.Ballentine, *Rev. Mod. Phys.*, **42**(1970), 358.
[2] D.Home and S.Sengupta, *Nuovo Cimento*, **82B**(1984), 214.
[3] G.G.Carbrera and M.Kiwi, *Phys. Rev.*, **A36**(1987), 2995.
[4] E.T.Jaynes and F.W.Cumming, *Proc. IEEE*, **51**(1963), 89.
[5] L.E.Ballentine, Quantum Mechanics (Prentice-Hall Inc., 1990), Chap. 15.
[6] 黄湘友,中国科学 A,(10)(1992),1065.
[7] X.Y.Huang, *Phys. Lett.*, **A115**(1986), 310.
[8] X.Y.Huang, *Chinese Phys. Lett.*, **4**(1987), 153.
[9] X.Y.Huang *et al.*, *Chinese Phys. Lett.*, **7**(1990), 152.
[10] 刘全慧、王发伯,物理学报,**40**(1991),1562.
[11] 黄湘友,量子力学新探(四川科技出版社,1989),111.
[12] Q.H.Liu, *Phys. Essay*(Canada), **3**(1990), 35.
[13] 黄湘友、刘全慧,田旭,裘忠平,物理学报,**42**(1993),180.
[14] X.Y.Huang, *Phys. Lett.*, **A121**(1987), 54.
[15] 黄湘友,中国科学 A,(3)(1988),313.
[16] 黄湘友,中国科学 A,(1)(1991),34.
[17] 黄湘友、彭金生,科学通报,**34**(1989),796.
[18] X.Y.Huang and J.S.Peng, *Physica Scripta*, **T21**(1988), 100.
[19] X.Y.Huang and J.S.Peng, *Chinese Phys. Lett.*, **6**(1989), 351.
[20] 周鹏,光电子激光,3(1992),133.

DOUBLE WAVE DESCRIPTION OF THE MOTION FOR A CHARGED PARTICLE IN MASS SPECTROMETER

HUANG XIANG-YOU
(*Department of Physics, Peking University, Beijing* 100871)
(Received 12 December 1994)

ABSTRACT

When and where a charged particle with given energy will enter or leave the magnetic field in a mass spectrometer, and how we use quantum mechanics to calculate them are interesting problems. The double-wave description of the system leads to the results that are similar to that of classical mechanics but the energies of particles take quantized discrete values.

PACC: 0365; 0250