第 56 卷 第 7 期 2007 年 7 月
1000-3290/2007/56(07)/3683-05

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.56,No.7,July,2007

无穷深势阱中相对论粒子的矩阵元及其经典近似*

梁麦林† 张福林 袁 兵

(天津大学理学院物理系,天津 300072)

(2006 年 11 月 23 日收到;2006 年 12 月 13 日收到修改稿)

对于无穷深势阱中自旋为 0(满足 Klein-Gordon 方程)和自旋为 1/2(满足 Dirac 方程)的相对论粒子,分别计算了坐标、动量以及速度算符的矩阵元. 在大量子数极限下,这些矩阵元给出相应的经典物理量(这里是狭义相对论中的有关量),并且满足正确的经典关系. 从而表明,Heisenberg 对应原理对这样的相对论体系也适用.

关键词:无穷深势阱,Klein-Gordon 方程,Dirac 方程,Heisenberg 对应原理

PACC:0365

1. 引 言

自从量子理论产生之日起,量子力学与经典力学的关系就一致是人们关心的热点问题之一. 最为流行,也最为大家所熟知和接受的对应原理是 Bohr 对应原理. 该对应原理指出,当量子数很大时,量子体系的行为过渡到经典体系的情况. 另一个对应原理,Heisenberg 对应原理近来也引起了人们的极大兴趣[1—4]. Heisenberg 对应原理[5—8]明确指出,在大量子数极限下,量子力学的矩阵元是经典物理量的 Fourier 展开系数. 换句话说,物理量可能矩阵元之和给出经典运动方程的解,即如果定义一个量

$$F_n(t) = \sum_k \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^*(x,t) F \psi_n(x,t) \mathrm{d}x, \quad (1)$$

那么该量在经典近似下应当给出经典解. 式中 F 是物理量所对应的厄米算符. 单从数学上讲,"双波理论"也有类似的结论[5—7]. 但在"双波理论"中,是取(1)式的实部,不过并没有给出相应的理由. 也许正是因为只取了实部,才造成该理论认为在量子数有限时,就可以描述一个单粒子的运动,这样的说法以及新定义的波函数等概念引起了人们的异议[8,9]. Heisebnerg 对应原理并不要求对(1)式所定义的量取实部. 在下面的运算中将看到,对于束缚态,当量子数有限时,(1)式定义的量是复数,因而不能用该量描述轨道或者一个粒子的运动. 但有一个对非相对论量子体系普适的结论:在大量子数极限下,其虚部消失,变成实数,就可以用(1)式定义的量描述经典运动[9]. 本文将这一研究推广到相对论性的量子体系.

下面首先对自旋为 0 的粒子在无穷深势阱中的运动进行处理,然后研究自旋为 1/2 的粒子的情况,最后是有关结论.

2. 势阱中自旋为 0 的粒子

在相对论量子力学中,自旋为 0 的粒子满足 Klein-Gordon 方程

$$\left(m^2 - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi(x,t) = -\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(x,t). \quad (2)$$

本文采取自然单位制即 Plank 常数和真空中的光速都取 1. 假如粒子被限制在 $x = [0, a]$ 范围内的无限深势阱中运动,不难求出方程(2)的解

$$\begin{aligned} \psi_n(x,t) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{n\pi x}{a} \exp(-\mathrm{i}E_n t), \\ E_n &= \pm\sqrt{m^2 + \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2}, \end{aligned} \quad (3)$$

量子数 $n = 1,2,3,\cdots$需要注意的是在相对论量子力学中有正能解和负能解之分. 正能解对应正粒子,负能解对应相应的反粒子. 在计算(1)式的矩阵元

---

* 国家自然科学基金(批准号:20376054)资助的课题.

† E-mail:mailinliang@eyou.com;mailinliang@yahoo.com.cn

时，应当对同一种粒子进行．对于正能解，坐标和动量有如下结果：

$$
\begin{aligned}
x_n(t) &= \frac{a}{2} + \frac{2a}{\pi^2} \\
&\quad \times \sum_{k=1}^{\infty}\left[\frac{1}{(k+n)^2} - \frac{1}{(k-n)^2}\right] \\
&\quad \times \exp[\mathrm{i}(E_k - E_n)t], \\
p_n(t) &= -\mathrm{i}\frac{4n}{a}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{k}{k^2-n^2} \\
&\quad \times \exp[\mathrm{i}(E_k - E_n)t].
\end{aligned}
\tag{4}
$$

在求和中要求 $k-n$ 是奇数．以下计算中，当 $k>n$ 时，令 $k=n+2l+1$；当 $k<n$ 时，令 $k=n-2l-1$．其中 l 是非负整数．一般情况下，(4)式是复数，因而不能说是一个粒子的坐标和动量．但在大量子数极限即 $n\to\infty$ 的情况下，(4)式变成实数

$$
\begin{aligned}
x_n(t) &= \frac{a}{2} + \frac{2a}{\pi^2} \\
&\quad \times \sum_{k>n}\left[\frac{1}{(k+n)^2} - \frac{1}{(k-n)^2}\right] \\
&\quad \times \exp[\mathrm{i}(E_k - E_n)t] \\
&\quad + \frac{2a}{\pi^2}\sum_{k<n}\left[\frac{1}{(k+n)^2} - \frac{1}{(k-n)^2}\right] \\
&\quad \times \exp[\mathrm{i}(E_k - E_n)t] \\
&= \frac{a}{2} + \frac{2a}{\pi^2} \\
&\quad \times \sum_{l=0}^{\infty}\left[\frac{1}{(2n+2l+1)^2} - \frac{1}{(2l+1)^2}\right] \\
&\quad \times \exp[\mathrm{i}(E_{n+2l+1} - E_n)t] \\
&\quad + \frac{2a}{\pi^2}\sum_{l=0}^{m}\left[\frac{1}{(2n-2l-1)^2} - \frac{1}{(2l+1)^2}\right] \\
&\quad \times \exp[\mathrm{i}(E_{n-2l-1} - E_n)t] \\
&\to \frac{a}{2} - \frac{2a}{\pi^2}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\exp[\mathrm{i}(E_{n+2l+1} - E_n)t]}{(2l+1)^2} \\
&\quad - \frac{2a}{\pi^2}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\exp[\mathrm{i}(E_{n-2l-1} - E_n)t]}{(2l+1)^2} \\
&= \frac{a}{2} - \frac{4a}{\pi^2}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{(2l+1)^2}\cos[(2l+1)\omega t],
\end{aligned}
\tag{5}
$$

$$
\begin{aligned}
p_n(t) &= -\mathrm{i}\frac{4n}{a}\left\{\sum_{k>n}\frac{k\exp[\mathrm{i}(E_k-E_n)t]}{k^2-n^2}\right. \\
&\quad \left. + \sum_{k<n}\frac{k\exp[\mathrm{i}(E_k-E_n)t]}{k^2-n^2}\right\} \\
&= -\mathrm{i}\frac{4n}{a}\left\{\sum_{k>n}\frac{k\exp[\mathrm{i}(E_k-E_n)t]}{(k-n)(k+n)}\right. \\
&\quad \left. + \sum_{k<n}\frac{k\exp[\mathrm{i}(E_k-E_n)t]}{(k-n)(k+n)}\right\} \\
&= -i\frac{4n}{a}\left\{\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(n+2l+1)\exp[\mathrm{i}(E_{n+2l+1}-E_n)t]}{(2l+1)(2n+2l+1)}\right. \\
&\quad \left. - \sum_{l=0}^{m}\frac{(n-2l-1)\exp[\mathrm{i}(E_{n-2l-1}-E_n)t]}{(2l+1)(2n-2l-1)}\right\} \\
&\to \frac{4n}{a}\frac{1}{2i}\left\{\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\exp[\mathrm{i}(2l+1)\omega t]}{2l+1}\right. \\
&\quad \left. - \sum_{l=0}^{\infty}\frac{\exp[-\mathrm{i}(2l+1)\omega t]}{2l+1}\right\} \\
&= \frac{4n}{a}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{2l+1}\sin[(2l+1)\omega t].
\end{aligned}
\tag{6}
$$

以上两式中 $\omega = n\pi^2/(E_n a^2)$．当 n 是偶数时，$m=(n-2)/2$；当 n 是奇数时，$m=(n-3)/2$．因此，当 $n\to\infty$ 时，有 $m\to\infty$．推导过程中，也用到了以下结果：当量子数 n 很大时

$$
\begin{aligned}
& E_{n\pm2l\pm1} - E_n \\
&= \sqrt{m^2 + \frac{(n\pm2l\pm1)^2\pi^2}{a^2}} - E_n \\
&\to \sqrt{m^2 + \frac{n^2\pi^2}{a^2} \pm 2(2l+1)\frac{n\pi^2}{a^2}} - E_n \\
&\to \sqrt{m^2 + \frac{n^2\pi^2}{a^2}} \pm 2(2l+1)\frac{n\pi^2}{E_n a^2} - E_n \\
&= \pm(2l+1)\omega.
\end{aligned}
\tag{7}
$$

从(5,6)式可得如下关系：

$$
\frac{\mathrm{d}x_n(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{p_n(t)}{E_n},
\tag{8}
$$

这与狭义相对论中的速度动量关系 $\nu = p/E$ 一致．可以证明，(5,6)式也与经典的坐标和动量一致．经典情况下，粒子在势阱中做往复运动，运动是周期性的．在一个周期之内，坐标和动量可以分别表示如下：

$$
x(t) = \begin{cases}\nu t, & 0 < t < T/2, \\ 2a - \nu t, & T/2 < t < T,\end{cases}
\tag{9}
$$

$$
p(t) = \begin{cases}p_c, & 0 < t < T/2, \\ -p_c, & T/2 < t < T,\end{cases}
\tag{10}
$$

其中 T 是往复一次所用的时间，$T = 2a/\nu = 2aE_c/p_c$．定义 $\omega = 2\pi/T = \pi p_c/(aE_c)$，对(9)和(10)式中的坐标和动量做级数展开，会分别得到(5,6)式的结果，只是要注意到经典近似下 $n\pi/a$ 成为经典动量 p_c，E_n 成为经典能量 E_c．计算表明，负能解有类似的结果，就不再赘述了．

3. 无穷深势阱中的自旋 1/2 粒子

由于负能解与正能解具有类似的结果，所以在下面的计算中，只讨论正能解的情况．定态情况下，体系的波函数可以写为

$$\psi(x,t) = \psi(x)\exp(-\mathrm{i}Et), \tag{11}$$

空间部分满足如下的 Dirac 方程：

$$(\alpha p + \beta m)\psi(x) = E\psi(x), \tag{12}$$

其中

$$\alpha\beta + \beta\alpha = 1, \alpha^2 = \beta^2 = 1. \tag{13}$$

可以令

$$\alpha = \begin{bmatrix} 0,1 \\ 1,0 \end{bmatrix}, \beta = \begin{bmatrix} 1,0 \\ 0,-1 \end{bmatrix}. \tag{14}$$

将波函数写成

$$\psi(x) = \begin{bmatrix} \chi \\ \varphi \end{bmatrix}, \tag{15}$$

代入方程(12)后，得到

$$(m - E)\chi + p\varphi = 0, \tag{16}$$

$$\varphi = \frac{p\chi}{m + E}. \tag{17}$$

将(17)式代入方程(16)，有结果

$$(m^2 + p^2)\chi = E^2\chi. \tag{18}$$

为了求解方程(18)，需要确定边界条件．在无限深势阱的外边，波函数为 0．根据波函数的连续性条件，波函数在边界处应为 0．但是在相对论的情况下，这里有一定的问题．对于自旋为 1/2 的粒子，波函数中有两个函数 χ 和 φ．而 φ 是 χ 的导数．在非相对论近似下，χ 是波函数，并在边界处连续，其导数在边界处不连续．为了不与非相对论的结果矛盾，我们取边界条件 $\chi(0) = \chi(a) = 0$，即 χ 在边界处连续，而 φ 不连续．容易求出波函数为

$$\psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{m + E_n}{aE_n}}\begin{bmatrix} 1 \\ \dfrac{p}{m + E_n} \end{bmatrix} \times \sin\frac{n\pi x}{a}\exp(-\mathrm{i}E_n t). \tag{19}$$

能量本征值 $E_n = \sqrt{m^2 + (n\pi/a)^2}$．对于自旋为 1/2 的相对论量子力学，存在一个速度算符

$$\alpha = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}, \tag{20}$$

该算符的本征值是真空中的光速，与有质量粒子的速度总是小于光速相矛盾．因此，有作者采取一些变化来协调 Dirac 理论与实际情况的关系，例如对坐标进行幺正变换[10]，引入新的坐标形式[11,12]等．对于势阱中的粒子，下面的计算表明速度算符的矩阵元可以给出经典速度．利用波函数(19)，经过一定的运算后得到

$$\begin{aligned} \alpha_n(t) &= \frac{\mathrm{d}x_n(t)}{\mathrm{d}t} \\ &= -\mathrm{i}\frac{4n}{aE_n}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{k}{k^2 - n^2} \\ &\quad \times \exp[\mathrm{i}(E_k - E_n)t], \end{aligned} \tag{21}$$

$$\begin{aligned} p_n(t) &= -\mathrm{i}\frac{4n}{a}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{k}{k^2 - n^2} \\ &\quad \times \frac{(m + E_k)(m + E_n) + (n\pi/a)^2}{\sqrt{4E_kE_n(m + E_k)(m + E_n)}} \\ &\quad \times \exp[\mathrm{i}(E_k - E_n)t]. \end{aligned} \tag{22}$$

这些矩阵元都是复数．在大量子数极限即 n 很大的情况下，虚部消失，即

$$\alpha_n(t) = \frac{4n}{aE_n}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{2l + 1}\sin[(2l + 1)\omega t]. \tag{23}$$

$$\begin{aligned} p_n(t) &= -\mathrm{i}\frac{4n}{a}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{k}{k^2 - n^2} \\ &\quad \times \frac{(m + E_k)(m + E_n) + (n\pi/a)^2}{\sqrt{4E_kE_n(m + E_k)(m + E_n)}} \\ &\quad \times \exp[\mathrm{i}(E_k - E_n)t] \\ &= -\mathrm{i}\frac{4n}{a}\sum_{k>n}\frac{k}{k^2 - n^2} \\ &\quad \times \frac{(m + E_k)(m + E_n) + (n\pi/a)^2}{\sqrt{4E_kE_n(m + E_k)(m + E_n)}} \\ &\quad \times \exp[\mathrm{i}(E_k - E_n)t] \\ &\quad -\mathrm{i}\frac{4n}{a}\sum_{k<n}\frac{k}{k^2 - n^2} \\ &\quad \times \frac{(m + E_k)(m + E_n) + (n\pi/a)^2}{\sqrt{4E_kE_n(m + E_k)(m + E_n)}} \\ &\quad \times \exp[\mathrm{i}(E_k - E_n)t] \\ &\to -\mathrm{i}\frac{4n}{a}\left\{\sum_{k>n}\frac{k}{k^2 - n^2}\exp[\mathrm{i}(E_k - E_n)t] \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k<n}\frac{k}{k^2 - n^2}\exp[\mathrm{i}(E_k - E_n)t]\right\} \\ &\to \frac{4n}{a}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{2l + 1}\sin[(2l + 1)\omega t]. \end{aligned} \tag{24}$$

在(24)式的推导过程中用到了这样的近似：无论 $k > n$ 还是 $k < n$，当 $n \to \infty$ 时，有

$$\frac{(m+E_k)(m+E_n)+(n\pi/a)^2}{\sqrt{4E_kE_n(m+E_k)(m+E_n)}}$$
$$=\frac{(m+E_{n\pm2l\pm1})(m+E_n)+(n\pi/a)^2}{\sqrt{4E_{n\pm2l\pm1}E_n(m+E_{n\pm2l\pm1})(m+E_n)}}$$
$$\to\frac{(m+E_n)(m+E_n)+(n\pi/a)^2}{\sqrt{4E_nE_n(m+E_n)(m+E_n)}}=1. \quad (25)$$

从(23，24)式可以看出，在量子数很大时有关系 $\alpha_n(t)=p_n(t)/E_n$，与狭义相对论中速度与动量的线性关系 $v=p/E$ 一致. 而量子数有限时的结果(21,22)没有这样的线性关系.

对于三维情况，(1)式可以写为

$$F_q(t)=\sum_Q\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_Q^+(x,y,z,t)\times F\psi_q(x,y,z,t)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z, \quad (26)$$

式中 q 或 Q 代表所有可能的量子数. 假如 x 方向上的运动仍然受到限制，在 y 方向和 z 方向上不受限制，则 Dirac 方程的解为

$$\psi_q(x,y,z,t)=\sqrt{\frac{m+E_q}{2E_q}}\begin{bmatrix}\chi_s\\ \dfrac{\sigma_1p_x+\sigma_2p_2+\sigma_3p_3}{m+E_q}\chi_s\end{bmatrix}\sqrt{\frac{2}{a}}\times\sin\frac{n\pi x}{a}\frac{\exp(\mathrm{i}yp_2+\mathrm{i}zp_3-\mathrm{i}E_nt)}{2\pi}, \quad (27)$$

其中 $E_q=\sqrt{m^2+(n\pi/a)^2+p_2^2+p_3^2}$ 是能量本征值，p_x 是 x 方向的动量算符，p_2 和 p_3 分别是 y 方向和 z 方向上的动量算符的本征值，σ_1，σ_2 和 σ_3 是三个 Pauli 矩阵，χ_s 可以选取为某一个 Pauli 矩阵的本征态. 对于 x 方向上的坐标、速度算符和动量与一维情况有类似的结论. 对于 y 方向和 z 方向，经过一定的运算得到

$$y_q(t)=\frac{p_2}{E_q}t,\quad (\alpha_2)_q(t)=\frac{p_2}{E_q},\quad (p_y)_q(t)=p_2, \quad (28)$$

$$z_q(t)=\frac{p_3}{E_q}t,\quad (\alpha_3)_q(t)=\frac{p_3}{E_q},\quad (p_z)_q(t)=p_3. \quad (29)$$

令分离的量子数 $n\to\infty$ 就会得到经典结果. 对于连续变化的量子数 p_2 和 p_3 则不需要取无限大的极限. 同时注意到，(29,30)式的结果在量子数有限时就是实数(这应该是 y 方向和 z 方向上的运动不受束缚导致的). 但是由于能量中的量子数 n 是分离的，所以(29,30)式不可能是经典运动的坐标或者速度. 如果 x 方向上的运动也不受限制，即自由粒子的情况，则由(26)式算出的就是经典结果.

4. 结 论

对于无限深势阱中的相对论粒子，计算了坐标、动量以及速度算符的矩阵元. 在大量子数极限下，这些矩阵元给出相应的经典物理量. 特别是自旋为 1/2 粒子的速度算符，也可以得到正确的经典速度. 这些结果表明，Heisenberg 对应原理对于这样的相对论体系也是适用的. 对于更为复杂的体系[13—16]，有关的研究正在进行中.

[1] Jia Y W，Liu Q H，Peng J H，Wang X，Shen K C 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 201(inChinese)[贾艳伟、刘全慧、彭解华、王 鑫、沈抗存 2002 物理学报 **51** 201]

[2] Greenberg W R，Klein A 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 1244

[3] Morehead J J 1996 *Phys. Rev.* A **53** 1285

[4] Liang M L，Wu H B 2003 *Physica Scripta* **68** 41

[5] Huang X Y，Wang J Y，Ye X M 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 566(in Chinese)[黄湘友、王继业、叶学敏 1999 物理学报 **48** 566]

[6] Zhang S，Zhu A D，Jin Z，Li Z K，Pan S M，Zhao Y F，Jing X G，Qian Z N，Su W H 2003 *Chin. Phys.* **12** 1360

[7] Liu Q H 1992 *Acta Phys. Sin.* **41** 697(in Chinese)[刘全慧 1992 物理学报 **41** 697]

[8] Shen H C，Shen H S 1994 *Science* (Shanghai，China) **46** 42(in Chinese)[沈惠川、沈惠申 1994 科学(上海) **46** 42]

[9] Liu Q H，Hu B 2001 *J. Phys. A: Math. Gen.* **34** 5713

[10] Foldy L L，Wouthuysen S A 1950 *Phys. Rev.* **78** 29

[11] O'Connell R F，Wigner E P 1977 *Phys. Lett.* A **61** 353

[12] Bunge M 2003 *Int. J. Theor. Phys.* **42** 135

[13] Zhang M C，Wang Z B 2006 *Acta Physica Sinica* **55** 521(in Chinese)[张民仓、王振邦 2006 物理学报 **55** 521]

[14] Chen G 2004 *Acta Physica Sinica* **53** 684(in Chinese)[陈 刚 2004 物理学报 **53** 684]

[15] Qiang W C 2004 *Chin. Phys.* **13** 571

[16] Chen Y，Li B 2004 *Chin. Phys.* **13** 302

Matrix elements and classical limit of relativistic particles in infinitely deep potential well*

Liang Mai-Lin† Zhang Fu-Lin Yuan Bing
(*Physics Department*, *School of Science*, *Tianjin University*, *Tianjin* 300072, *China*)
(Received 23 November 2006; revised manuscript received 13 December 2006)

Abstract

For relativistic particles with spin-0 (satisfying the Klein-Gordon equation) and spin-1/2 (satisfying the Dirac equation) in infinitely deep potential well, matrix elements for the coordinate, momentum and the velocity operators are calculated. In the limit of large quantum numbers, these matrix elements give the corresponding classical quantities (nowbeing related quantities in special relativity) and satisfy exact classical relations. These results show that the Heisenberg correspondence principle is applicable to such relativistic systems.

Keywords: infinitely deep potential well, Klein-Gordon equation, Dirac equation, Heisenberg correspondence principle
PACC: 0365

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (20376054).
† E-mail: mailinliang@eyou.com; mailinliang@yahoo.com.cn