

DOI:10.19789/j.1004-9398.2022.01.005

文献引用:马嘉辉,曾天海,范乐乐.动量表象中自由演化的一维高斯波包的相干性[J].首都师范大学学报(自然科学版),2022,43(1):24-27. MA J H, ZENG T H, FAN L L. Coherence of a freely evolving one-dimensional Gaussian wave packet in momentum representation[J]. Journal of Capital Normal University(Natural Science Edition),2022,43(1):24-27.

动量表象中自由演化的一维高斯波包的相干性*

马嘉辉¹, 曾天海^{1**}, 范乐乐²

(1. 北京理工大学物理学院, 北京 100081; 2. 西北大学物理学院, 陕西 西安 710127)

摘要:相干度可用于定量计算各种量子态的相干性.自由演化的高斯波包会出现“波包弥散”,其相干度可能会随时间变化.不同表象中,同一个态的相干度是不同的.本文在动量表象中,应用 l_1 -范数、量子相对熵、方差和标准差4种度量方法分别计算一维高斯波包的相干度.计算结果表明: l_1 -范数和量子相对熵得到的整个波包的相干度都是定值,与时间无关;方差和标准差得到的结果分别与所选维数的比值,也都趋于定值.这表明波包虽然会弥散,但其在动量表象中的相干度保持不变.因此,这4种相干度的定义都描述了量子态的整体相干度是不变的,但不能对若干子波干涉的相干度细节进行描述.

关键词:高斯波包;自由演化;相干性

中图分类号:O413

Coherence of a freely evolving one-dimensional Gaussian wave packet in momentum representation*

MA Jiahui¹, ZENG Tianhai^{1**}, FAN Lele²

(1. School of Physics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081;

2. School of Physics, Northwest University, Xi'an Shaanxi 710127)

Abstract: The degree of coherence can be used to quantitatively calculate the coherence of various quantum states. The freely evolving Gaussian wave packet will “wave packet dispersion”, and its degree of coherence may change with time. In different representations, the degree of coherence of the same state is different. In momentum representation, the coherence of one-dimensional Gaussian wave packet is calculated by using four measurement methods: l_1 -norm, quantum relative entropy, variance and standard deviation, respectively. The results show that the degree of coherence of the whole wave packet obtained by l_1 -norm or quantum relative entropy is constant and independent of time, and the ratio of variance or standard deviation to the selected dimension tends to a constant value. This indicates that although the wave packet will disperse, the degree of coherence in momentum representation remains unchanged. Therefore, the definitions of all these four degrees of coherence describe the overall degree of coherence of the quantum state being invariant, but cannot describe the details of the degree of coherence of some wavelet interference.

Keywords: Gaussian wave packet; freely evolving; coherence

CLC: O413

收稿日期:2021-05-19

*国家自然科学基金项目(11875086)

**通信作者: zengtianhai@bit.edu.cn

0 引言

量子力学诞生以前,物理学家认为粒子和波是2种不同的事物,二者是不能联系在一起的.直到1923年,de Broglie^[1]提出实物粒子也具有波动性这一观点,使人们认识到粒子类似于光子,也具有波粒二象性.1927年,粒子的波动性被电子在晶体表面的衍射实验所验证^[2].随后,电子束的单缝衍射和双缝干涉等实验验证了电子束具有波动性^[3-4].近年来的实验证实单电子和单原子具有波动性^[5],也是波粒二象性的有力证据.在量子力学中,粒子的一种运动状态可以用高斯波包来描述^[6-11].高斯波包所描述的系统,其波函数呈高斯型分布,在运动时能表现出和粒子一样的特性^[7].高斯波包虽然是一个比较简单的模型,但是作为一个经典的研究对象,与粒子有着许多共性.

粒子波动性的重要特征是相干性,是粒子量子态的叠加与量子干涉现象之间的桥梁.直到十几年前,相干性一直用于定性的讨论.近年来,相干性的大小(相干度)已有了几种度量的定义,可以定量计算一个系统状态的相干度.相干度与选取的表象有关,不同表象下相干度的大小不同.如在能量表象中,处于能量本征态的运动粒子,没有相干性;而在坐标表象中,粒子总是处于不同坐标本征态的叠加态,就总是有相干性.如在坐标表象中计算一维类氢原子中电子状态的相干度^[12]和双谐振子之一的相干度^[13].可以说,在坐标表象中的相干性是平凡的,因为任意粒子的坐标都是连续变量,不同坐标本征态难以在实验中表现相干性.本文用另一种连续变量——动量,在其表象中计算一维自由演化的高斯波包的相干度.由坐标表象中的波函数出发,用傅里叶变换将其变换到动量表象中,根据动量表象中的波函数得出密度矩阵.使用4种不同的定义,分别计算一维高斯波包自由演化时,其相干度的变化情况.

1 自由演化的一维高斯波包

设一维自由运动高斯波包初始时刻的归一化波函数为^[14]

$$\psi(x,0) = (2\pi)^{-\frac{1}{4}} \sigma^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}\right], \quad (1)$$

式中: σ 为波峰的宽度.

对式(1)作傅里叶变换,得到动量表象中的波

函数为

$$\psi(p,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{x'} \psi(x',0) e^{-ipx'/\hbar} dx', \quad (2)$$

积分得到

$$\psi(p,0) = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{\sigma^2 p^2}{\hbar^2} - \frac{ipx_0}{\hbar}\right), \quad (3)$$

则包含时间演化因子的波函数为

$$\psi(p,t) = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{\sigma^2 p^2}{\hbar^2} - \frac{ipx_0}{\hbar} - \frac{ip^2 t}{2m\hbar}\right). \quad (4)$$

作代换 $\frac{\sigma p}{\hbar} \rightarrow p$,则代换后的 p 为无量纲量,式(4)改写为

$$\varphi(p,t) = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}} \exp(-p^2 - i\lambda p - icp^2 t), \quad (5)$$

式中:参数 λ 和 c 分别为

$$\lambda = \frac{x_0}{\sigma}, c = \frac{\hbar}{2m\sigma^2}. \quad (6)$$

对式(5)进行归一化,其归一化常数(A)满足

$$\begin{aligned} A^2 \int_p \varphi^*(p,t) \varphi(p,t) dp &= A^2 \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \int_p e^{-2p^2} dp \\ &= A^2 \frac{\sigma}{\hbar} = 1. \end{aligned} \quad (7)$$

那么,归一化波函数为

$$\varphi(p,t) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp(-p^2 - i\lambda p - icp^2 t), \quad (8)$$

密度矩阵元表示为

$$\begin{aligned} \rho_{pq} &= |\varphi(p,t)\rangle \langle \varphi(q,t)| = \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp[-(p^2 + q^2) - i\lambda(p - q) - ic(p^2 - q^2)t]. \end{aligned} \quad (9)$$

2 相干度计算

各种相干度的定义大同小异.如果对应一种定义,能够做出一种测量装置,则可以类比测量温度的各种温度计,如水银温度计和红外温度计等.度量一个量子体系的量子相干性的大小,需要根据具体的物理问题选定表象或一组固定的基 $\{|i\rangle\}$,这组基通常称作非相干基.在非相干基下,所有的对角态称为非相干态,其相干度都为0^[15],即

$$g = \sum_i p_i |i\rangle \langle i|, \quad (10)$$

式中: $\{p_i\}$ 为一组可能的概率分布,非相干态的集合

用 I 表示. 由这组基可以得到各种叠加态及各种混合态, 其中一类是所有的基以等概率叠加的纯态及其混合态. 这一类组成的集合中, 每一个态的相干度都达到最大, 可以称为最大相干态集合. 相干度的定义有 2 类: 一类是基于抽象的距离函数 (D) 的相干度量 (C_D) 可以表示为

$$C_D(\rho) = \min_{\vartheta \in I} D(\rho, \vartheta). \quad (11)$$

其意义是态 ρ 与集合 I 中最近的一个非相干态的距离, 这个距离越大相干度也越大; 另一类是与最大相干态距离越近的态, 其相干度越大. 各种定义中的距离函数也有所不同.

2.1 l_1 -范数相干度

系统所有非相干量子态组成的集合记为 I , 由 l_1 -范数定义的相干度是指系统密度矩阵 ρ 与系统的每个非相干量子态 $\vartheta (\vartheta \in I)$ 的差(距离)的 l_1 -范数的最小值^[16], 更直观的计算方法是对密度矩阵的所有非对角元的模求和^[17], 其表达式为

$$C_{l_1} = \min_{\vartheta \in I} \|\rho - \vartheta\|_{l_1} = \sum_{p \neq q} |\rho_{pq}|. \quad (12)$$

通过计算体系的 l_1 -范数相干度, 可以得到系统所处状态的相干程度.

由式(9)可以得到密度矩阵元素的模为

$$|\rho_{pq}| = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-(p^2 + q^2)}. \quad (13)$$

因动量是连续变量, 系统的 l_1 -范数定义中的求和变为积分

$$C_{l_1} = \sum_{p \neq q} |\rho_{pq}| = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(p^2 + q^2)} dp dq - 1 = \sqrt{2\pi} - 1. \quad (14)$$

2.2 量子相对熵相干度

量子相对熵定义的相干度为, 所有的非相干态相对于体系所处态的相对熵(距离)的最小值^[16], 量子相对熵最优化后的解析形式为

$$C_r = \min_{\sigma \in I} S(\rho \parallel \sigma) = S(\rho_d) - S(\rho), \quad (15)$$

式中: I 为系统所有非相干量子态组成的集合, ρ_d 的对角元与 ρ 中的取值相同, 其他所有非对角元取值都为 0^[18], 则

$$S(\rho_d) = \sum_p \left[-\rho_{pp} \log_2(\rho_{pp}) \right] = - \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{pp} \log_2(\rho_{pp}) dp = - \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-2p^2} \log_2 \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{2p^2} \right) dp = \frac{1}{2} \log_2 \left(\frac{\pi e}{2} \right). \quad (16)$$

由于一维高斯波包态为纯态, 即有 von Neu-

mann 熵 $S(\rho) = 0$ ^[19], 那么量子相对熵为

$$C_r = S(\rho_d) - S(\rho) = \frac{1}{2} \log_2 \left(\frac{\pi e}{2} \right). \quad (17)$$

2.3 方差和标准差相干度

方差相干度 ($C_v(\rho)$) 和标准差相干度 ($C_\sigma(\rho)$) 的定义为^[20]: 计算所考虑的态中各个本征态与最大相干态中对应的概率的方差和标准差(2种距离), 并考虑体系的希尔伯特空间的维数, 得到 2 种描述系统相干性大小的度量方法, 其计算式分别为:

$$C_v(\rho) = d - 1 - d^2 D(\mathbf{X}_\rho), \quad (18)$$

$$C_\sigma(\rho) = \left[\sqrt{d-1} - d\sigma(\mathbf{X}_\rho) \right]^2, \quad (19)$$

式中: d 为体系的维数, \mathbf{X}_ρ 为密度矩阵的对角元素的集合, $D(\cdot)$ 表示求方差, $\sigma(\cdot)$ 表示求标准差.

系统在动量表象下维数为无穷大, 因而采取分立取值计算. 随着动量绝对值的增加, 其本征波函数的概率以指数趋于 0. 这部分对方差的贡献不大, 故只留下概率在最大概率的万分之一到最大概率之间的数据, 这样就可以确定动量的范围. 再根据选取的散点数量 (n), 为方便计算, 此处的 n 为动量为正的散点数, 相应动量为负的点以及零点也会考虑进维数里, 确定步长和维数 (d), $d = 2n + 1$. 对上述得到的数据进行归一化操作后, 得到的方差相干度和标准差相干度如表 1 所示. 由表可知, 取的散点数量越多, 即考虑的维数越多, 相干度越大, 而 $\frac{C_v}{d}$ 或 $\frac{C_\sigma}{d}$ 的比值越接近于 1. 这 2 种相干度改为 $\frac{C_v}{d}$ 或 $\frac{C_\sigma}{d}$ 来定义更合理.

表 1 不同散点数量下的相干度计算结果

散点数	方差相干度	标准差相干度
1×10^1	$1.845\ 744 \times 10^1$	$1.043\ 378 \times 10^1$
1×10^2	$1.985\ 664 \times 10^2$	$1.675\ 675 \times 10^2$
1×10^3	$1.998\ 577 \times 10^3$	$1.894\ 736 \times 10^3$
1×10^4	$1.999\ 858 \times 10^4$	$1.966\ 418 \times 10^4$
1×10^8	$2.000\ 000 \times 10^8$	$1.999\ 663 \times 10^8$

3 讨论

本文利用 4 种度量方法计算了一维高斯波包的相干度, 结果表明动量表象中, 一维高斯波包的相干度不随时间变化, 其原因分别为: (1) 计算系统的 l_1 -范数时, 参与积分运算的是密度矩阵的非对角元的模. 而对自由演化的一维高斯波包, 在动量表象

下,其与时间相关的项都分布在非对角元素中指数的虚数部分,非对角元取模后与时间无关.所以,基于 l_1 -范数的相干度与时间无关.(2)计算系统的量子相对熵时,其第 1 项只有密度矩阵的对角元参与了运算,而密度矩阵的对角元不含时间参量,又由于这个密度矩阵所表征的是一个纯态的系统,所以第 2 项 von Neumann 熵为 0.因此,基于量子相对熵的相干度与时间无关.(3)计算系统的方差相干度和标准差相干度时,由于对角元不含时,则其方差和标准差也与时间无关.因此,得到的系统的方差相干度和标准差相干度也与时间无关.

4 结 论

通过比较 4 种相干度的计算方法,对于连续变量而言, l_1 -范数和量子相对熵这 2 种相干度计算更为简便.但最大相干度结果的数值因量子系统而异,而方差和标准差这 2 种定义改成 $\frac{C_v}{d}$ 或 $\frac{C_\sigma}{d}$ 后,可以得到类似于概率最大为 1 的结果.因此,这 4 种定义各有优缺点.虽然在坐标表象中,自由演化的一维高斯波包会随时间扩散至全空间,但在动量表象中各个本征态的概率幅不随时间发生变化.计算结果表明,整个波包的相干度不随时间变化.说明这些关于相干度的定义虽然可以描述整体波包的相干性,但不能描述细节的变化,还应该给出描述细节变化的相干度定义.如单缝、双缝或多缝的衍射和干涉,是子波的干涉.因此,若定义叠加态中的若干子态之间的相干度,有可能更好地描述量子态相干度的细节变化.

参 考 文 献

- [1] DE BROGLIE L. Waves and quanta[J]. Nature, 1923, 112(2815):540.
- [2] DAVISSON C, GERMER L H. The scattering of electrons by a single crystal of nickel [J]. Nature, 1927, 119 (2998):558-560.
- [3] JÖNSSON C. Elektroneninterferenzen an mehreren künstlich hergestellten Feinspalten [J]. Zeitschrift Für Physik, 1961, 161(4):454-474.
- [4] JÖNSSON C. Electron diffraction at multiple slits [J]. American Journal of Physics, 1974, 42(1):4-11.
- [5] MURRAY A. Double slits with single atoms[J]. Physics World, 2020, 49(3):181-183.
- [6] 赵健,秦杰利,李卫东.一维谐振子量子运动中的经典特性[J].大学物理,2009,28(10):14-16+19.
- [7] 夏小建.一维受迫谐振子量子运动的经典特性[J].大学物理,2011,30(8):22-24+29.
- [8] FOUOKENG G C, TCHOFFO M, FAI C L, et al. The quenching field effect on the motion of an electron in an electromagnetic field potential [J]. Modern Physics Letters B, 2014, 28(8):1450058.
- [9] HAVUKAINEN M, DROBNÝ G, STENHOLM S, et al. Quantum simulations of optical systems [J]. Journal of Modern Optics, 1999, 46(9):1343-1367.
- [10] WANG L F, WANG Y W, RAN S Y, et al. Quantum coherence and electric field control of the photodetached electron on elastic surface [J]. Journal of Chemical Physics, 2009, 130(17):174706.
- [11] GIUNTI C. Coherence and wave packets in neutrino oscillations [J]. Foundations of Physics Letters, 2004, 17 (2):103-124.
- [12] 刘兆斌,李凯,曾天海,等.类氢原子核质量对电子状态的影响[J].物理学报,2021,70(7):070301.
- [13] ZENG T H, LIU Z B, LI K, et al. Outgrowth of quasi pure states in isolated coupled-harmonic-oscillator [J]. International Journal of Modern Physics B, 2021, 35 (5):2150075.
- [14] 张永德.量子力学[M].4版.北京:科学出版社,2017:76-77.
- [15] 于晓东.量子相干性与量子互文性的理论研究[D].济南:山东大学,2017:2-3.
- [16] BAUMGRATZ T, CRAMER M, PLENIO M B. Quantifying coherence [J]. Physical Review Letters, 2014, 113(14):140401.
- [17] 李冬沫.相干性转化的量子纠缠分布研究[D].大连:大连理工大学,2019:20-22.
- [18] 邵连合.量子相干性度量及其相关问题研究[D].西安:陕西师范大学,2017:17-18.
- [19] 李晶.f-冯·诺依曼相对熵的性质及其应用[D].西安:陕西师范大学,2018:19-20.
- [20] LI K, LIU Z B, ZENG T H. Variance measure of coherence of quantum pure states [J]. International Journal of Theoretical Physics, 2019, 58(4):3252-3258.

(责任编辑:兰丽丽)