

一维谐振子势阱中二全同粒子的空间关联

刘志伟, 孙保元

(兰州大学核科学与技术学院, 甘肃 兰州 730000)

摘要: 针对一维谐振子势阱中由两个全同粒子组成的体系, 假设其空间波函数分别具有以下 3 种交换对称性: 1) 没有交换对称性 2) 对于交换是反对称情况 3) 对于交换是对称情况, 讨论了二粒子空间相对位置的分布概率, 并由此将量子力学教材中自由粒子情况下的结论推广至一维谐振子束缚态情形, 即两个全同粒子无论是处于自由态还是束缚态, 在空间波函数交换对称的情况下, 两个粒子靠拢的概率最大, 而交换反对称情况下, 两个粒子靠近 ($r \rightarrow 0$) 的概率趋于零. 论文结论有助于加深对量子力学中全同粒子交换对称性及其物理效应的理解.

关键词: 全同粒子; 交换对称性; 一维谐振子势; 空间关联

中图分类号: O 413.1

文献标识码: A

文章编号: 1000-0712(2017) 04-0006-06

【DOI】10.16854/j.cnki.1000-0712.2017.04.002

全同性原理是量子力学五大公理性假设之一, 即在全同粒子所组成的体系中, 两个全同粒子实行交换后, 体系仍然处于相同的状态, 其波函数具有确定的交换对称性^[1]. 实验表明, 全同多粒子体系按照波函数的粒子交换对称性可以分为: 粒子交换对称体系与粒子交换反对称体系, 分别对应着自旋为 \hbar 整数倍的玻色子与半奇数倍的费米子, 并且各自遵循着玻色-爱因斯坦统计和费米-狄拉克统计规律. 2009 年, 中国科学家首次通过操纵多光子纠缠态和量子模拟方法证实了一种存在于二维空间的奇特粒子“任意子”, 可以服从分数统计规律, 其波函数对两粒子坐标交换可以获得一个任意数值的统计相位^[2]. 近年来, 基于微观多体系统的交换对称性, 对各种新奇的量子效应的研究已成为前沿热点. 为更直观地认识由交换对称性所导致的量子效应, 在文献[3]第五章第五节“全同粒子系与波函数的交换对称性”一节中新增例题 1. 题设有两个相同的自由粒子, 均处于动量本征态, 试分别 3 种情况讨论它们在空间的相对位置的分布概率, 即空间波函数: 1) 没有交换对称性; 2) 对于交换是反对称情况; 3) 对于交换是对称情况. 需要注意, 此处的讨论并未考虑粒子的内禀自由度(如自旋等), 因此空间波函数相应的对称性并不直接对应于体系总波函数的统计性质, 即交换对称型(交换反对称型)的空间波函数并不直接联系玻色子系统(费米子系统), 在下

文的讨论中我们也将按此方式, 只讨论空间波函数的相关物理性质. 此时通过计算可以得到 3 种情况下两粒子相对距离为 r 时的概率密度 $P(r)$:

$$P(r) \propto \begin{cases} 1 + \frac{\sin 2kr}{2kr}, & (\text{对称情况}) \\ 1, & (\text{无对称情况}) \\ 1 - \frac{\sin 2kr}{2kr}, & (\text{反对称情况}) \end{cases} \quad (1)$$

其中, k 表示两粒子的相对波矢量, 在此设其值为 $1/2$ 并据此忽略 r 的量纲. 可见, 在空间波函数交换对称的情况下, 两粒子靠拢的概率最大, 而交换反对称情况下, 两粒子靠近 ($r \rightarrow 0$) 的概率趋于零, 但当 $r \rightarrow \infty$ 时, 三种情况将再无差别, 此时波函数的交换对称性的影响逐渐消失(图 1). 通过这样一个可观

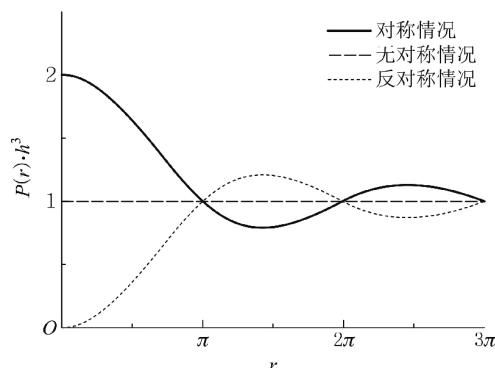


图 1 三维空间中, 两个全同粒子的相对位置的
概率密度分布 h 为普朗克常量

收稿日期: 2016-09-09; 修回日期: 2016-11-03

基金项目: 兰州大学研究生课程建设项目资助; 中央高校基本科研业务费专项资金资助 (lzujbky-2016-30)

作者简介: 刘志伟(1993—)男(满族), 辽宁省丹东市宽甸满族自治县人, 兰州大学核科学与技术学院 2016 级硕士研究生.

通讯作者: 孙保元, Email: sunby@lzu.edu.cn

测的实例,人们可以更直观地认识由交换对称性所导致的量子效应.

此例题只讨论了二粒子自由态情形,作为一个自然推广和有益的练习,本文将问题引申至一维谐振子势阱中二粒子束缚态情形,并据此检验交换对称性对两个全同粒子相对位置分布影响,讨论结论的势场依赖性.为了简化分析,首先可将教材讨论约化为一维自由态情况.

1 一维自由态情况

假设在一维空间中,存在两个全同的自由粒子,均处于动量本征态,若体系的空间波函数无交换对称性,则体系波函数可表示为

$$\psi_{k_1 k_2}(x_1, x_2) = \frac{1}{h} \exp[i(k_1 x_1 + k_2 x_2)] \quad (2)$$

其中 k_1, k_2 分别为两粒子的一维波矢量; x_1, x_2 分别为两粒子的一维空间坐标.为将体系的质心运动与相对运动分离,引入线性变换:

$$\begin{cases} r = x_1 - x_2, & (\text{相对坐标}) \\ R = \frac{x_1 + x_2}{2}, & (\text{质心坐标}) \\ k = \frac{k_1 - k_2}{2}, & (\text{hk 相对动量}) \\ K = k_1 + k_2, & (\text{hK 总动量}) \end{cases} \quad (3)$$

式(2)经过上述线性变换后,可化为

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{h}} \exp(iKR) \phi_k(r) \quad (4)$$

式中

$$\phi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{h}} \exp(ikr) \quad (5)$$

$\phi_k(r)$ 即两个全同粒子相对运动部分的空间波函数,由其可得两粒子相对距离为 r 时的概率密度为

$$P(r) = 2|\phi_k(r)|^2 = \frac{2}{h} \quad (6)$$

其中,系数 2 为考虑到在一维空间中波矢具有两个方向.

若体系的空间波函数对于交换是反对称情况,则其按如下方式构建:

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{h} \{ \exp[i(k_1 x_1 + k_2 x_2)] - \exp[i(k_2 x_1 + k_1 x_2)] \} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{h}} \exp(iKR) \phi_k(r) \end{aligned} \quad (7)$$

式中

$$\phi_k(r) = i \sqrt{\frac{2}{h}} \sin kr \quad (8)$$

由上式可得到

$$P^A(r) = 2|\phi_k(r)|^2 = \frac{2}{h} (1 - \cos 2kr) \quad (9)$$

若体系的空间波函数对于交换是对称情况,可类似得到

$$P^S(r) = \frac{2}{h} (1 + \cos 2kr) \quad (10)$$

略去无关紧要的常数因子 $2/h$, 则

$$P(r) \propto \begin{cases} 1 + \cos 2kr, & (\text{对称情况}) \\ 1, & (\text{无对称情况}) \\ 1 - \cos 2kr, & (\text{反对称情况}) \end{cases} \quad (11)$$

可以看出,在 3 种情况下,两个全同粒子的相对位置的分布概率是很不相同的.在此设 k 值为 $1/2$, 并据此忽略 r 的量纲,结果如图 2 所示.

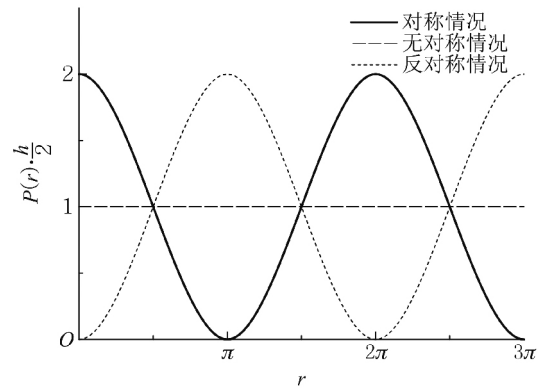


图 2 一维空间中,两个全同粒子的相对位置的
概率密度分布

可见,在空间波函数交换对称的情况下,两个粒子靠拢的概率最大,而交换反对称情况下,两个粒子靠近 ($r \rightarrow 0$) 的概率趋于零,这与三维空间下的结果一致.不同的是,对称和反对称情况中概率密度分布并不会随 r 增大而快速衰减,仍表现为周期性振荡,这是因为一维情况不需要作角向积分的缘故.

2 一维谐振子势阱情况

现对例题模型进行推广,以一维谐振子势阱为例,研究束缚态情况下,空间波函数的交换对称性对两个全同粒子相对位置分布的影响,讨论势场引入对于结果的影响.

2.1 基本公式

设在一维空间中,存在一个谐振子势阱:

$$V(x) = \frac{1}{2} Cx^2 \quad (12)$$

其中, C 表征简谐作用力的强度. 由波动力学解法可解析得到相应单粒子运动的波函数:

$$\psi_n(x) = N_n \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2\right) H_n(\alpha x) \quad (13)$$

式中

$$N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{2\pi(C\mu)^{\frac{1}{2}}}{h}} \quad (14)$$

N_n 是归一化常数, H_n 是厄米多项式, μ 是粒子的静止质量, α 具有长度倒数的量纲, 可表征势阱的形状. 在此设其值为 1, 并据此忽略 x 的量纲.

若在上述一维谐振子势阱中存在两个全同粒子, 忽略其自旋属性及相互作用, 当一粒子处于 n 能级, 另一粒子处于 m 能级时, 体系的空间波函数可写作:

$$\begin{aligned} \psi_{nm}^{S(A)}(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_n(x_1) \psi_m(x_2) \pm \psi_n(x_2) \psi_m(x_1) \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} N_n N_m \exp\left(-\frac{1}{2} x_1^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2} x_2^2\right) \cdot \\ & \quad [H_n(x_1) H_m(x_2) \pm H_n(x_2) H_m(x_1)] \end{aligned} \quad (15)$$

其中, 当体系的空间波函数交换对称时系统取加号; 交换反对称时系统取减号; 没有交换对称性时, 仅取中括号内两个多项式中任意一个(后文一致). 上式经线性变换式(3)后, 可化为

$$\begin{aligned} \psi_{nm}^{S(A)}(R, r) &= \frac{1}{\sqrt{2}} N_n N_m \exp(-R^2) \exp\left(-\frac{1}{4} r^2\right) \cdot \\ & \quad \left[H_n\left(\frac{2R+r}{2}\right) H_m\left(\frac{2R-r}{2}\right) \pm H_n\left(\frac{2R-r}{2}\right) H_m\left(\frac{2R+r}{2}\right) \right] \end{aligned} \quad (16)$$

此时体系的空间波函数的归一化条件可写作:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{nm}^{S(A)*}(x_1, x_2) \psi_{nm}^{S(A)}(x_1, x_2) dx_1 dx_2 &= \\ 4 \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \psi_{nm}^{S(A)*}(R, r) \psi_{nm}^{S(A)}(R, r) dR dr &= 1 \end{aligned} \quad (17)$$

其中, 换元积分时引入的雅克比行列式等于 1, 并且上式考虑了波函数的空间对称性. 在以下讨论中也只需在 $R > 0$ 的区间开展分析.

上述体系的质心运动与相对运动波函数一般不能完全分离. 一方面, 是因为在体系的空间波函数式(15)中存在复杂的厄米多项式, 导致波函数很难完全分解为只含质心坐标与只含相对

坐标的两个多项式相乘的形式; 另一方面, 由于两个全同粒子对称分布于质心两侧, 质心坐标的改变也会影响两个全同粒子所感受势场的强度. 因此不同于自由粒子的特殊情况, 两个全同粒子的质心运动与相对运动间通常存在耦合, 两个全同粒子的相对位置的概率密度分布一般也与质心坐标 R 相关. 由此可定义两个全同粒子的全空间概率密度:

$$P_{nm}^{S(A)}(R, r) \equiv |\psi_{nm}^{S(A)}(R, r)|^2 \quad (18)$$

对于一般的耦合情况, 需将全空间概率密度对质心坐标 R 进行积分, 得到两粒子相对距离为 r 时的“平均”概率密度:

$$P_{nm}^{S(A)}(r) \equiv \int P_{nm}^{S(A)}(R, r) dR \quad (19)$$

为使图象更加直观, 下面将举例 3 种情形对结果展开讨论.

2.2 例 1: $n=0, m=1$ 情形

虽然在一维谐振子势阱中, 两个全同粒子的质心运动与相对运动之间通常存在耦合, 但也有少数退耦的特例. 例如, 当一个粒子处于基态, 另一个粒子处于第一激发态时 ($n=0, m=1$), 具有确定交换对称性的体系的空间波函数式(15)可完全分离为质心运动与相对运动两部分, 分别有:

$$\begin{cases} \psi_{01}^A = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp(-R^2) \phi_{01}^A(r) \\ \psi_{01}^S = 2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp(-R^2) R \phi_{01}^S(r) \end{cases} \quad (20)$$

$\phi_{0,1}^{A(S)}$ 即两个全同粒子相对运动部分的空间波函数, 由其可得两粒子相对距离为 r 时的概率密度为:

$$\begin{cases} P_{01}^A(r) = |\phi_{01}^A(r)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} r^2\right) r^2 \\ P_{01}^S(r) = |\phi_{01}^S(r)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} r^2\right) \end{cases} \quad (21)$$

而当没有交换对称性时, 质心运动与相对运动之间出现耦合, 此时体系的空间波函数可写作:

$$\psi_{01} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \exp(-R^2) \exp\left(-\frac{1}{4} r^2\right) (2R-r) \quad (22)$$

按照式(18)定义, 可得到相对位置的概率密度:

$$P_{01}(r) \equiv \int |\psi_{01}(R, r)|^2 dR = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} r^2\right) \left(\frac{1+r^2}{2}\right) \quad (23)$$

其恰好为对称和反对称情况结果的平均.

图 3 中展示了 3 种不同的交换对称情况下两个全同粒子的全空间概率密度分布结果. 发现波函数交换对称情况时, 概率密度分布的极值位于 $r=0$ 处; 反对称情况时, 则位于 $r \neq 0$ 处; 而无对称情况时, 全空间概率密度分布关于对角线 $r=2R$ 对称分布. 由图 4 进一步发现, 对于二粒子分别处于基态和第一激发态的情况, 在空间波函数交换对称的情况下, 两个粒子靠拢的概率最大, 而交换反对称情况下, 两个粒子靠近 ($r \rightarrow 0$) 的概率趋于零, 这与之前结论一致, 而无对称情况的结果介于两者之间, 恰好为两者结果的平均. 此外, 由于谐振子势阱的束缚作用, 导致两粒子相对距离为 r 时的概率密度会随 r 增大而快速趋零, 有别于一维自由态时周期性振荡的趋势.

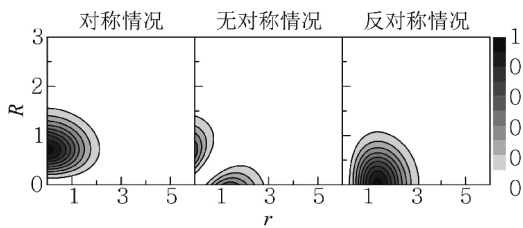


图 3 一维谐振子势阱中 $n=0, m=1$ 时, 两个全同粒子的全空间概率密度分布轮廓图

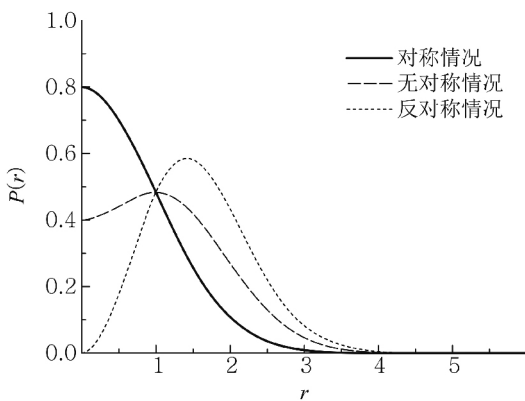


图 4 一维谐振子势阱中 $n=0, m=1$ 时, 两个全同粒子的相对位置的概率密度分布

此外, 图 3、图 4 给出质心运动与相对运动可完全分离的直观判据: 若质心运动与相对运动可完全分离, 则质心坐标 R 的变化不会改变相对位置分布概率曲线的基本形状.

2.3 例 2: $n=0, m>1$ 情形

设一个粒子处于基态 ($n=0$), 另一个粒子处于 $m>1$ 的激发态, 此时体系的质心运动与相对

运动波函数不能完全分离, 则两个全同粒子的全空间概率密度:

$$P_{0m}^{S(A)}(R, r) = \frac{4}{\pi 2^{m+1} m!} \exp(-2R^2) \exp\left(-\frac{1}{2}r^2\right) \cdot \left[H_m\left(\frac{2R-r}{2}\right) \pm H_m\left(\frac{2R+r}{2}\right) \right]^2 \quad (24)$$

图 5 给出了对称与反对称两种情况下两个全同粒子的全空间概率密度分布结果.

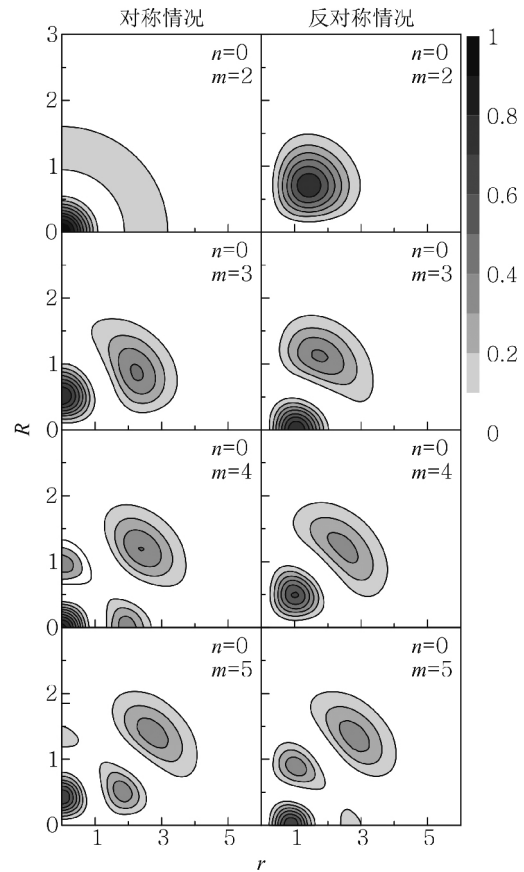


图 5 一维谐振子势阱中 $n=0$ 时, 两个全同粒子的全空间概率密度分布轮廓图

由图 5 可见: 在一维谐振子势阱中, 当一个粒子处于基态 ($n=0$), 另一个粒子处于 $m>1$ 的激发态时, 两个全同粒子的质心运动与相对运动之间存在耦合. 全空间概率密度分布不再是仅与相对距离 r 有关的简单演化, 而是受到 R 的调制, 且随着 m 的增大, 分布图案越来越复杂. 但观察概率密度极值点的分布, 可以发现与 m 取值无关的规律: 波函数交换对称情况时, 极值点对应 $r=0$; 而反对称情况时, 极值点对应 $r \neq 0$. 相关结论可通过分析对 R 积分后的概率密度 $P_{0m}^{S(A)}(r)$ 进一步确认, 如图 6 所示. 在空间波函数交换对称的情况下, 两个粒子

靠拢的概率最大,而交换反对称情况下,两个粒子靠近($r \rightarrow 0$)的概率趋于零.

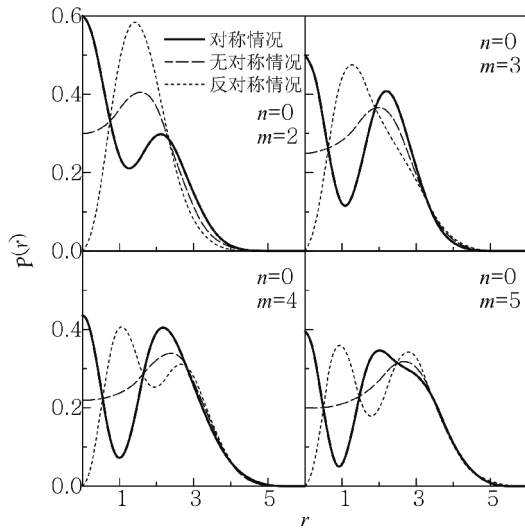


图6 一维谐振子势阱中 $n=0$ 时,两个全同粒子的相对位置的概率密度分布

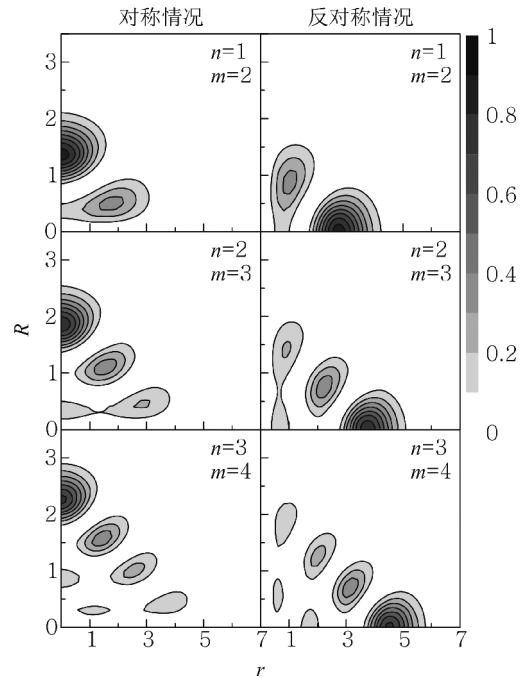


图7 一维谐振子势阱中 $m=n+1$ 时,两个全同粒子的概率密度分布轮廓图

2.4 例3: $m=n+1$ 和 $m=n+2$ 情形

设两个全同粒子间的能级差固定,若能级差为奇数,取能级差为1,即一个粒子处于 n 能级,另一个粒子处于 $m=n+1$ 能级,则两个全同粒子的全空间概率密度:

$$P_{m+1}^{S(A)}(R, r) = \frac{4}{\pi(2^{n+1}n!)^2(n+1)} \exp(-2R^2) \exp\left(-\frac{1}{2}r^2\right) \cdot \left[H_n\left(\frac{2R+r}{2}\right) H_{n+1}\left(\frac{2R-r}{2}\right) \pm H_n\left(\frac{2R-r}{2}\right) H_{n+1}\left(\frac{2R+r}{2}\right) \right]^2 \quad (25)$$

若能级差为偶数,取能级差为2,即一个粒子处于 n 能级,另一个粒子处于 $m=n+2$ 能级,则两个全同粒子的全空间概率密度:

$$P_{m+2}^{S(A)}(R, r) = \frac{4}{2\pi(2^{n+1}n!)^2(n+1)(n+2)} \exp(-2R^2) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}r^2\right) \left[H_n\left(\frac{2R+r}{2}\right) H_{n+2}\left(\frac{2R-r}{2}\right) \pm H_n\left(\frac{2R-r}{2}\right) H_{n+2}\left(\frac{2R+r}{2}\right) \right]^2 \quad (26)$$

图7、图8给出了两个全同粒子能级差固定情况下的全空间概率密度分布,可以发现波函数交换对称情况时概率密度分布的极值会出现在 $r=0$ 处;而反对称情况时,则位于 $r \neq 0$ 处,这与之前的结果相一致.对于能级差为偶数的情况,全空间概率密度分布还额外产生了关于对角线 $r=2R$ 的对称分布.

进一步对质心坐标 R 积分得到两个全同粒子的相

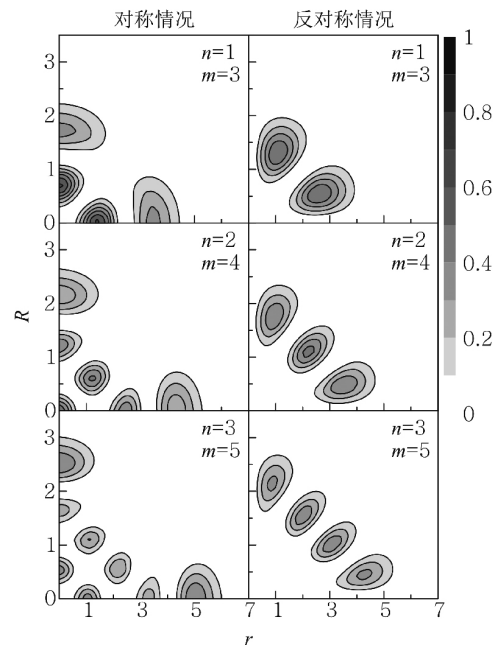


图8 一维谐振子势阱中 $m=n+2$ 时,两个全同粒子的全空间概率密度分布轮廓图

对位置的概率密度分布,如图9、图10所示.结果仍表明:在一维谐振子势阱中,当两个全同粒子间的能级差固定时,在空间波函数交换对称的情况下,两个粒子靠拢的概率最大,而交换反对称情况下,两个粒子靠近($r \rightarrow 0$)的概率趋于零,并且与能级差的奇偶性无关.

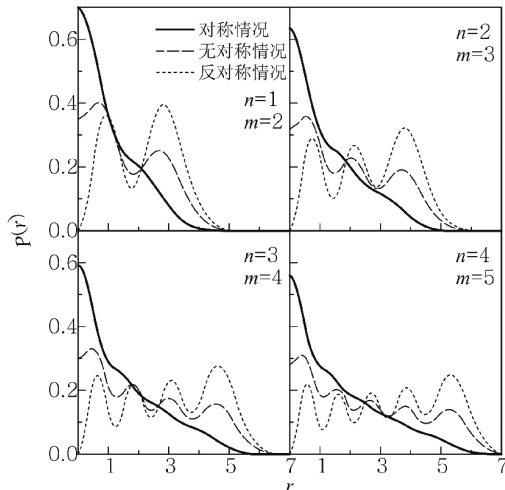


图 9 一维谐振子势阱中 $m = n + 1$ 时, 两个全同粒子的相对位置的概率密度分布

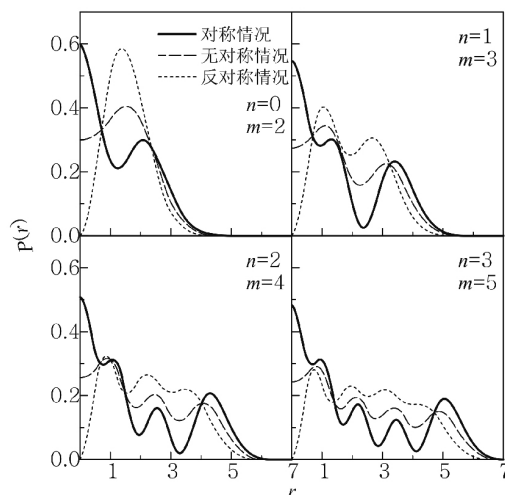


图 10 一维谐振子势阱中 $m = n + 2$ 时, 两个全同粒子的相对位置的概率密度分布

3 结论

本文基于不同的交换对称性, 讨论了一维谐振子势阱中两个全同粒子的空间相对位置的分布概率. 对量子力学教材中相关例题模型作了一般性推广, 即两个全同粒子无论是处于自由态还是一维谐振子束缚态, 在空间波函数交换对称的情况下, 两个粒子靠拢的概率最大, 而交换反对称情况下, 两个粒子靠近 ($r \rightarrow 0$) 的概率趋于零, 无交换对称情况下, 两粒子空间相对位置的分布概率介于对称与反对称情况之间. 通过采用二维轮廓图开展分析, 可以更直观地展现全同粒子间的空间关联特征. 该讨论内容可用于量子力学相关章节的教学当中, 对于丰富教学内容, 提高教学质量是一种很好的尝试. 此外, 相对于自由态情形, 束缚态模型更具实验可操作性, 这将有助于人们深入理解由空间波函数交换对称性所导致的量子效应, 因此将结论推广至更一般的势阱情况具有理论和实验的双重价值.

参考文献:

- [1] 钱伯初. 量子力学 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2008: 300-304.
- [2] Chao-Yang Lu, Wei-Bo Gao, Jian-Wei Pan, et al. Demonstrating Anyonic Fractional Statistics with a Six-Qubit Quantum Simulator [J]. Phys Rev Lett, 2009, 102: 030502.
- [3] 曾谨言. 量子力学: 卷 I [M]. 4 版. 北京: 科学出版社, 2007: 178-183.

Spatial correlations of two identical particles in one-dimensional harmonic oscillator potential

LIU Zhi-wei, SUN Bao-yuan

(School of Nuclear Science and Technology, Lanzhou University, Lanzhou, Gansu 730000, China)

Abstract: Inspired by a sample question in the textbook of quantum mechanics, the spatial correlations of two identical particles in the one-dimensional harmonic oscillator potential are discussed, where the exchange symmetry of wave function is assumed to be classical, symmetrical and anti-symmetrical, respectively. It is found that the results for free particles still hold for the one-dimensional harmonic oscillator bound states, namely, when the exchange symmetry is symmetrical, the two particles tend to draw close each other, the probability of two particles approaching each other ($r \rightarrow 0$) tends to be zero while when anti-symmetrical, which will be useful for understanding the quantum effects induced by the exchange symmetry.

Key words: identical particles; exchange symmetry; one-dimensional harmonic oscillator potential; spatial correlations.