

## 基于实稳定方法求解单粒子共振态的 Wigner 函数

张 涵<sup>1</sup>, 刘志伟<sup>1</sup>, 任政学<sup>2</sup>, 孙保元<sup>1</sup>

(1. 兰州大学 核科学与技术学院, 甘肃 兰州 730000;

2. 北京大学 物理学院, 北京 100871)

**摘要:** 利用坐标空间的实稳定方法, 求解了一维势场中单粒子散射态与其中共振态的本征值问题, 由得到的单粒子本征波函数进一步给出相应的 Wigner 函数, 分析了单粒子散射态与其中共振态的相空间分布特征. 发现除了本征能量与本征波函数存在差异, Wigner 函数在相空间的具体分布行为也可用于区分单粒子共振态与一般的散射态, 在相关的量子测量实验中可能用作确定量子态的特征判据.

**关键词:** 共振态; 散射态; 实稳定方法; Wigner 函数

中图分类号: O 413.1

文献标识码: A

文章编号: 1000-0712(2018)01-0017-04

【DOI】10.16854/j.cnki.1000-0712.170117

在量子力学中, 单个粒子(或体系)的量子态是不能观测的, 但对于在同样实验条件下制备出来的粒子(或体系)所构成的系综而言, 量子态的测量是有意义的. 而在测量量子态的实验中, 发现 Wigner 函数可以作为一个定量描述量子态的特征量, 它与波函数或密度矩阵等价, 能够直接从实验中测量得到. Wigner 函数是定义在相空间中的一个实函数, 它具有准概率分布函数的性质, 但是 Wigner 函数并非粒子坐标和动量的联合分布, 因为这违反了海森伯不确定度关系. 特别是 Wigner 函数既可以取正值, 也可以取负值, 而取负值正是非经典性质的反映<sup>[1,2]</sup>. 实验上, 若测量得到负值的 Wigner 函数, 可以认为其对应于非经典场的统计<sup>[3]</sup>. 而对于准经典态, Wigner 函数值恒大于等于零.

曾谨言所著《量子力学 卷 II》<sup>[1]</sup>教材中举例给出了一维谐振子的基态和低激发态的 Wigner 函数, 此外也有文献讨论了无限深方势阱中单粒子的 Wigner 函数<sup>[4]</sup>. 但在更一般的研究中, 量子体系的势场深度通常是有限的, 其能谱既包含有束缚态, 也包含散射态. 不同于束缚态, 坐标表象下散射态波函数可以在势阱外无限延展. 但在散射态中也存在一类特殊的能量本征态, 即共振态, 其波函数主要分布于势阱内, 并且相关能级寿命比较长, 类似于束缚态. 因此, 进一步研究单

粒子共振态与一般散射态的 Wigner 函数分布, 拓展教材中的相关讨论, 将有助于加深对量子态问题的认识. 研究共振态的理论方法主要有两类, 一类是传统的散射理论, 如 R 矩阵理论、K 矩阵理论、S 矩阵理论等; 另一类是类束缚态处理方法, 即基于成熟的束缚态处理方法来研究共振态, 例如复标度法<sup>[5]</sup>、解析延拓法<sup>[6]</sup>、实稳定方法<sup>[7-9]</sup>等. 其中比较简单的一种方法是实稳定方法, 其主要物理思想为通过检验本征能量对于基空间维数的稳定性来区分不同的量子态. 即在分立谱能区, 各束缚态的本征能量不会随基空间维数的改变而改变. 但在连续谱能区, 各散射态的本征能量多数会随基空间维数的增加而逐渐降低. 但仍有一些特殊的散射态, 其本征能量几乎不随基空间维数的增加而改变, 称之为实稳定态, 可以认为其对应于单粒子共振态. 文献 [7] 和 [8] 分别在谐振子基空间和坐标空间内应用实稳定方法, 讨论了一维势场中的单粒子共振态问题.

本文尝试利用坐标空间的实稳定方法, 求解一维势场中的单粒子本征方程, 得到单粒子散射态的本征能量和本征波函数, 并寻找其中的共振态, 进一步给出相应的 Wigner 函数, 分析单粒子散射态与其中共振态的相空间分布特征.

收稿日期: 2017-03-14; 修回日期: 2017-08-09

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( lzujbky-2016-30) 资助

作者简介: 张涵(1994—), 男, 甘肃陇南人, 兰州大学核科学与技术学院 2015 级研究生.

通讯作者: 孙保元; Email: sunby@lzu.edu.cn

## 1 理论方法与数值细节

为便于理解,这里以一个简单的一维势场为例来说明问题,如图1所示,其可表示为

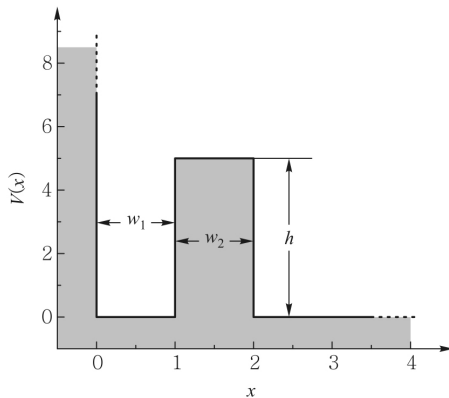


图1 一维势场  $V(x)$  其中  $w_1$ 、 $w_2$ 、 $h$  分别对应着势场的阱宽、垒宽和垒高.

$$V(x) = \begin{cases} +\infty, & x < 0 \\ 0, & 0 \leq x < w_1 \\ h, & w_1 \leq x < w_1 + w_2 \\ 0, & w_1 + w_2 \leq x \end{cases} \quad (1)$$

势场参数选取为: 阱宽  $w_1 = 1$ , 垒宽  $w_2 = 1$ , 垒高  $h = 5$  (在这样的势场下,既存在类似于束缚态的共振态,同时存在一般的散射态).在势场  $V(x)$  中,单粒子本征能量和本征波函数满足一维定态的薛定谔方程:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (2)$$

为方便讨论,采用自然单位,即  $\hbar = m = 1$ .在给定的—维势场下,薛定谔方程可进一步分段写为下列方程组形式:

$$\begin{cases} \psi_1''(x) + 2E\psi_1(x) = 0, & 0 \leq x < w_1 \\ \psi_2''(x) + 2(E-h)\psi_2(x) = 0, & w_1 \leq x < w_1 + w_2 \\ \psi_3''(x) + 2E\psi_3(x) = 0, & w_1 + w_2 \leq x \end{cases} \quad (3)$$

并且本征波函数应当满足如下边界条件和连续性条件:

$$\begin{cases} \psi_1(0) = 0 \\ \psi_1(w_1) = \psi_2(w_1) \\ \psi_1'(w_1) = \psi_2'(w_1) \\ \psi_2(w_1 + w_2) = \psi_3(w_1 + w_2) \\ \psi_2'(w_1 + w_2) = \psi_3'(w_1 + w_2) \end{cases} \quad (4)$$

而散射态波函数在无穷远处将渐近趋于平面波形式,因此在坐标空间数值求解上述方程组时需引入坐标截断.对于束缚态,当所选取的坐标截断足够大时,本征能量等结果将不受截断参数影响,但对于散

射态,结果将敏感依赖于截断参数的选取,这是由于散射态波函数本身的空间延展性所导致的.理论上发展了一系列的类束缚态处理方法来解决这个问题,如实稳定方法等.实稳定方法在不同大小的基空间上求解本征值问题,通过检验本征能量对于基空间维数的稳定性来区分不同的量子态.若选择的基空间是谐振子基空间<sup>[7]</sup>,则通过改变谐振子基的数目来实现基空间大小的改变;若选择的基空间是坐标空间<sup>[8,9]</sup>,则通过改变坐标空间(形象的将坐标空间的选取比作“盒子”,即表示数值计算所选取的坐标空间的大小)的大小来实现基空间大小的改变.对于—维系统,坐标空间取为  $-x_m \leq x \leq x_m$ ,可以得到本征能量随“盒子”大小  $x_m$  的变化关系.数值模拟过程中,利用 shooting 方法,根据不同的空间截断的选取,求解了上述薛定谔方程,得到对应本征波函数以及本征能量.

本文使用的是坐标空间的实稳定方法,对于—般情况,当增大波函数的存在范围,即增大“盒子”大小时,粒子位置的不确定度相应地增大.根据不确定度关系,此时粒子动量的不确定度将随之减小,本征能量也相应减小.但存在一类特殊情况,其能量随“盒子”大小改变而变化很小,这些态就对应着共振态.这是由于单粒子共振态波函数主要分布于势阱内,其位置不确定度基本不受“盒子”大小的影响,因此相应的本征能量也基本不受“盒子”大小的影响.

由坐标空间单粒子波函数  $\psi(x)$  可以定义相应的 Wigner 函数<sup>[1,10]</sup>:

$$W(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left( x + \frac{x'}{2} \right) \psi \left( x - \frac{x'}{2} \right) \exp\left( \frac{ipx'}{\hbar} \right) dx' \quad (5)$$

利用实稳定方法求解得到散射态与其中共振态的本征波函数,可以给出相应的 Wigner 函数,用于分析单粒子散射态与其中共振态的相空间分布特征.

## 2 共振态与散射态的分布特征

在图1所示—维势场下,我们利用坐标空间的实稳定方法求解本征值问题,分别给出了主量子数  $n = 1, 2, 3, 4, 5$  时各本征能量随“盒子”大小的变化关系,如图2所示.可以看出各本征能量总体随“盒子”增大而减小,但存在一个特殊的“盒子”区间,其中本征能量出现稳定的平台( $E \approx$

2.7) 且基本不随  $x_m$  的增加而改变. 基于之前的物理分析, 可以认为平台处的解即对应于单粒子共振态.

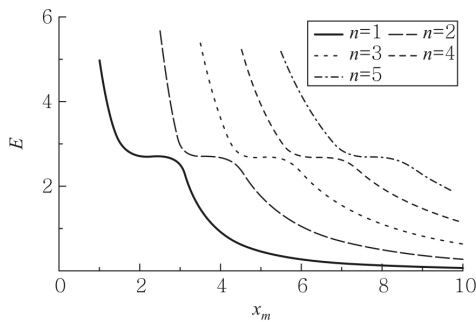


图 2 一维势场中, 各本征能量随“盒子”大小的变化

为了更直观理解单粒子共振态与一般散射态的差异, 这里分别给出主量子数  $n=1, 2, 3, 4, 5$  所对应的本征波函数, 如图 3 所示. 其中包括: (a) 为图 2 中平台处 ( $E \approx 2.7$ ) 所对应的共振态波函数, 相对应的“盒子”大小  $x_m$  分别为 2.5、3.5、5、6.5、8; (b) 和 (c) 分别为固定本征能量 ( $E \approx 1.6$  为例), 相对应的“盒子”大小  $x_m$  分别为 3.5、5、6.5、8、10 和固定“盒子”大小 ( $x_m = 9$  为例) 给出的散射态波函数. 可以发现, 对于单粒子共振态, 其波函数主要分布于势阱内, 在势阱外振幅明显衰减, 并且具体分布形式与“盒子”大小  $x_m$  的选取基本无关; 对于选取不同“盒子”大小而固定本征能量的单粒子散射态, 其波函数在势

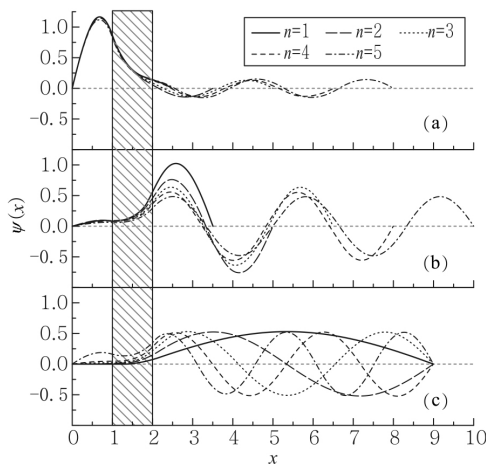


图 3 一维势场中, (a) 本征能量  $E \approx 2.7$  的单粒子共振态波函数, (b) 本征能量  $E \approx 1.6$  的单粒子散射态波函数, (c) 固定盒子大小  $x_m = 9$  时的单粒子散射态波函数

阱内振幅很小, 主要分布于势阱外, 并且具体分布形式也与“盒子”大小  $x_m$  的选取基本无关; 此外还可以发现, 由于散射态波函数主要分布在势阱以外, 因此外部波函数的差异将会明显导致散射能量的改变.

如前所述, 在给出平台条件得到共振态能量后, 单粒子共振态波函数的空间分布就基本确定了. 因此下面以主量子数  $n=1$  的单粒子本征态为例, 选取其共振态能量  $E \approx 2.7$  且“盒子”大小  $x_m = 2.5$  (图 3(a) 情形) 进一步分析其 Wigner 函数, 并选取主量子数  $n=1$ , 本征能量  $E \approx 1.6$  且“盒子”大小  $x_m = 3.5$  的散射态 (图 3(b) 情形) 相应作比较.

### 3 Wigner 函数分布

#### 3.1 单粒子共振态的 Wigner 函数

图 4 即一维势场中, 单粒子共振态的 Wigner 函数的三维分布图. 可以发现, 共振态的 Wigner 函数主要分布于势阱内 ( $0 < x < 1$ ) 在势阱外的贡献很小, 这与单粒子共振态波函数的空间分布一致; 动量方向上, Wigner 函数随动量  $p$  绝对值增大而震荡衰减.

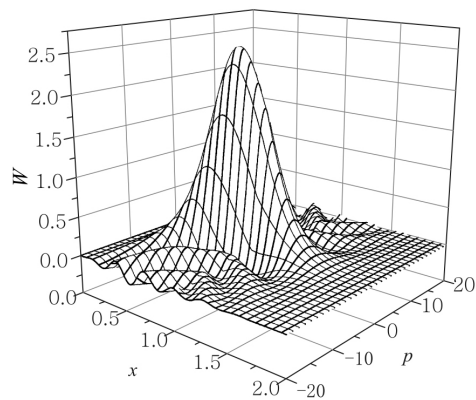


图 4 一维势场中, 单粒子共振态的 Wigner 函数的三维分布图

Wigner 函数既可以取正值, 也可以取负值, 而取负值正是体系非经典性质的反映. 为更直观地体现非经典特性, 进一步给出 Wigner 函数的二维 Contour 图, 如图 5 所示, 其中阴影部分表示函数负值区域. 可以发现, 单粒子共振态的 Wigner 函数在相空间中会出现明显的负值区域. 在坐标  $x \approx 0.7$  处, 亦即在势阱中, 当动量  $p \approx \pm 7$  时, 函数的负值达到极小, 这表明此时的量子效应最为显著; 此外, 当动量  $p$  绝对值较小时, Wigner 函数恒为正值. 这是由于 Wigner

函数中的低动量成分对应于粒子能量较低的情况,此时粒子基本被囚禁在势阱当中,倾向于准经典情形.

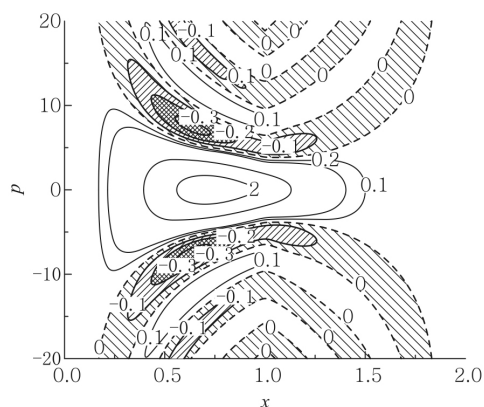


图 5 一维势场中,单粒子共振态的 Wigner 函数的 Contour 图

### 3.2 单粒子散射态的 Wigner 函数

图 6 即一维势场中,单粒子散射态的 Wigner 函数的三维分布图.可以发现,单粒子散射态的 Wigner 函数主要分布于势阱外,在势阱内 ( $0 < x < 1$ ) 的贡献很小,这与单粒子散射态波函数的空间分布一致;动量方向上,随着动量  $p$  绝对值的增大,其 Wigner 函数也是震荡衰减的.

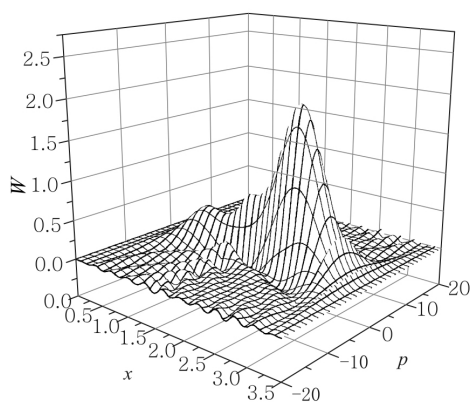


图 6 一维势场中,单粒子散射态的 Wigner 函数的三维分布图

进一步给出相应 Wigner 函数的二维 Contour 图,如图 7 所示,其中阴影部分表示函数负值区域.可以发现,单粒子散射态的 Wigner 函数在相空间中也出现明显的负值区域,但分布行为与共振态的结果有所差异,其极小值出现的位置移动到势垒之中.即在坐标  $x \approx 1.5$  处,当动量  $p \approx \pm 3$  时,函数的负值达到极小,这表明此时的量子效应最为显著.

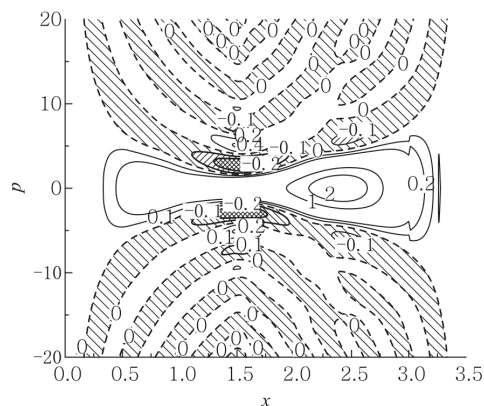


图 7 一维势场中,单粒子散射态的 Wigner 函数的 Contour 图

## 4 结论

本文利用坐标空间的实稳定方法,求解了一维特殊势场中的单粒子本征方程,分别从本征能量和本征波函数两方面对单粒子散射态,特别是其中的共振态进行了讨论,并根据对应的本征波函数计算了 Wigner 函数,分析了单粒子散射态与其中共振态的相空间分布特征.研究发现,对于一维势场中的单粒子共振态,其 Wigner 函数主要分布于势阱内,在势阱外的贡献很小,并且在势阱内函数的负值达到极小,这表明此时量子效应在势阱内相对更为显著;对于一般的单粒子散射态(非共振态),其 Wigner 函数主要分布于势阱外,在势阱内的贡献很小,并且在势垒中函数的负值达到极小,这表明此时量子效应在势垒中相对更为显著.该讨论内容可用于量子力学课程相关章节的教学环节中,对于丰富教学内容,加深对于波函数与 Wigner 函数物理内涵的认识是一种很好的尝试.此外,Wigner 函数在相空间的具体分布行为可作为除本征能量与本征波函数之外,区分共振态与一般散射态的另一判据,特别是该判据更易在实验测量中作验证.该讨论也可进一步应用于原子和原子核中单粒子共振态和散射态物理的研究中.

### 参考文献:

- [1] 曾谨言.量子力学:卷 II [M].5 版.北京:科学出版社,2014:64-83.
- [2] D'Auria V, Lee N, Amri T, et al. Quantum Decoherence of Single - Photon Counters [J]. Phys Rev Lett, 2011, 107: 050504.

(下转 24 页)

本文得到教育部基础学科拔尖学生培养实验计划 No.20170601、北京高等学校“青年英才计划” YETP0004 的支持,其中拔尖计划的初衷就是为了回答钱学森之问。

### 参考文献:

- [1] 中国大百科全书[M].第二版简明版.北京:中国大百科全书出版社,2011:73-77.  
[2] 不列颠百科全书国际中文版[M].北京:中国大百科全

书出版社,2012:274-275.

- [3] 维基百科[EB/OL].<https://en.wikipedia.org/wiki/Physics>.  
[4] 教育部.国务院关于深化考试招生制度改革的实施意见[EB/OL].[http://www.moe.edu.cn/publicfiles/business/htmlfiles/moe/moe\\_1778/201409/174543.html](http://www.moe.edu.cn/publicfiles/business/htmlfiles/moe/moe_1778/201409/174543.html).  
[5] 笛卡儿.哲学原理[M].北京:商务印书馆,1959:XVII.  
[6] 牛顿.自然哲学的数学原理[M].北京:北京大学出版社,2012.

## The definition of physics and the process of physical cognition

MU Liang-zhu

(School of Physics ,Peking University ,Beijing 100871 ,China)

**Abstract:** An explicit definition of physics is given.And a possible process of physical cognition is also concluded.

**Key words:** physical cognition; physics; process of cognition

(上接 20 页)

- [3] Bimbard E ,Boddeda R ,Vitrant N ,et al.Homodyne Tomography of a Single Photon Retrieved on Demand from a Cavity-Enhanced Cold Atom Memory[J].Phys Rev Lett , 2014 ,112: 033601.  
[4] 徐皓,石田君.Wigner 函数的性质及其在一维无限深势阱和一维谐振子中的应用[J].原子核物理评论,2011,28(1):44-50.  
[5] Y.K.Ho.The method of complex coordinate rotation and its applications to atomic collision processes[J].Phys Rep , 1983 ,99(1):1-68.  
[6] Kukulin V I ,Krasnopl'sky V M ,Horcek J.Theory of Resonances: Principles and Applications [M].Kluwer Academic ,Dordrecht ,1989.  
[7] Hazi A U ,Taylor H S.Stabilization Method of Calculating Resonance Energies: Model Problem [J].Phys Rev A , 1970 ,1: 1109-1120.  
[8] 张力,周善贵,孟杰.单粒子共振态的实稳定方法研究[J].物理学报,2007,56(7):3839-3844.  
[9] 张力.原子核单粒子共振态的实稳定方法研究[J].北京大学:硕士论文,2008.  
[10] 谢传梅,范洪义.Wigner 函数的简单引入[J].大学物理,2012,31(5):17-18.

## Solving the Wigner function of single-particle resonant state based on real stabilization method

ZHANG Han<sup>1</sup> ,LIU Zhi-wei<sup>1</sup> ,REN Zheng-xue<sup>2</sup> ,SUN Bao-yuan<sup>1</sup>

(1. School of Nuclear Science and Technology ,Lanzhou University ,Lanzhou ,Gansu 730000 ,China;

2. School of Physics ,Peking University ,Beijing 100871 ,China)

**Abstract:** Using the real stabilization method in coordinate space ,the eigen-function of the single particle scattering state and resonant state in a one-dimensional potential are solved.In addition ,the corresponding Wigner functions are given from the single-particle eigen-wave function ,and the characteristic distribution of these Wigner functions in phase space is analyzed ,which is proved to be a useful tool to distinguish the single-particle resonant state from the general scattering state and thus can be used as a criterion for studying the quantum properties in the relevant quantum measurement experiments.

**Key words:** resonant states; scattering states; real stabilization method; Wigner functions.