## 3.1 相干态

薛定谔方程或许是物理学史上最特殊的方程。它使关于几率波函数的时间演化方程，但在写下这个神奇方程时薛定谔本人并不了解波函数的物理意义。经典物理中物理体系的状态可以用共轭物理量的相空间中的轨迹描述，而波粒二象性所导致的不确定关系告诉我们：“经典物理中的共轭物理量之间无法同时测准，不能在采用轨道来描述量子物理体系”。薛定谔试图寻找满足最小不确定关系的量子态，在不确定关系 $\Delta x \Delta p = \hbar/2$ 允许范围之内，这个最小不确定波包在动量和坐标的相空间中仍然具有轨道。薛定谔成功了，他找到最小不确定波包——相干态，相干态的坐标和动量平均值随时间演化行为满足经典物理相空间轨道。

为了获得上述的准经典波包，我们首先需要找到满足最小不确定关系的波包（波函数），其次还要保证在随时间演化过程中该波包始终满足最小不确定关系。我们已经推导过，满足最小不确定关系的坐标空间的波函数一定是高斯函数。设最小不确定关系的波函数所对应的坐标平均值和动量平均值分别是 $\langle \hat{x} \rangle$ 和 $\langle \hat{p} \rangle$，则有

$$\psi(x) = Ce^{i\langle \hat{p} \rangle x/\hbar}\; e^{-(x-\langle \hat{x} \rangle)^2/4(\Delta x)^2}. \tag{3.1.1}$$

自由粒子的高斯波包虽然满足最小不确定关系。但随着时间演化它要发生扩散而不再满足最小不确定关系，所以不满足我们的要求。第二个候选者是简谐振子势的基态波函数

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar}. \tag{3.1.2}$$

它对应于最小不确定关系波函数中 $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$, $(\Delta x)^2 = \hbar/2m\omega$, $(\Delta p)^2 = \hbar m\omega/2$。简谐振子基态 $\psi_0(x)$ 满足最小不确定关系，但它是定态，不随时间变化。其波函数的几率密度峰值位于原点，对应于经典振子的静止状态。这丝毫不奇怪，因为我们求解的是简谐振子势的定态解，它的几率密度不随时间变化，坐标平均值为零，动量平均值也为零。所以，我们无法利用简谐振子势的基态波函数来讨论经典物理运动方程。薛定谔进一步从简谐振子基态出发得到一种特殊的最小不确定波包，并指出在简谐振子势场中运动的这种特殊波包运动始终都满足最小不确定关系而不发生扩散。这种特殊的状态被命名为“相干态”。

在讨论量子力学问题之前，我们先回顾一下经典物理中的简谐振子运动。经典简谐振子具有如下能量：

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2, \tag{3.1.3}$$

或者

$$p^2 + (m\omega x)^2 = 2mE, \quad \omega = \sqrt{k/m}. \tag{3.1.4}$$

经典谐振子运动可以用相空间 $(m\omega x, p)$ 平面中的的轨道描述，其随时间演化的周期性行为可以用相空间中的匀角速度的逆时针圆周运动描述。如图形3.1中左图所示，轨

道的圆形半径为 $\sqrt{2mE}$，圆心在原点处。定义复数变量 $z$，

$$z = \frac{m\omega x + ip}{\sqrt{2mE}} = \frac{m\omega x + ip}{\sqrt{2\hbar m\omega}}, \tag{3.1.5}$$

则经典简谐振子在相空间中的运行轨道为

$$z(t) = z_0 e^{-i\omega t}. \tag{3.1.6}$$

注意：为了和量子力学对应，我们已经选取能量的计量单位是 $\hbar\omega$。

经典物理中的周期运动要求物理体系的初态偏离平衡点。以小角度周期运动的单摆为例，首先我们应该需要使单摆离开平衡点，例如用手将单摆提升一定高度后释放，之后我们才可以观测到单摆的周期运动。在量子力学中我们如何实现这种初始条件哪？我们需要对基态波函数进行一次平移，即设在初始 $t=0$ 时刻有

$$\langle x\rangle = x_0 \neq 0, \quad \langle p\rangle = p_0 \neq 0, \tag{3.1.7}$$

则波包为

$$\psi(x,t=0) = \psi(x-x_0,t=0) = Ce^{ip_0x/\hbar}e^{-m\omega(x-x_0)^2/2\hbar}. \tag{3.1.8}$$

这个函数描述 $t=0$ 时刻中心值位于相空间中 $(p_0, m\omega x_0)$ 处的波包。可以验证 $\psi(x,t=0)$ 仍然满足最小不确定态，具有和 $\psi_0(x)$ 相同的 $\Delta x$ 和 $\Delta p$，区别仅仅在于 $\exp(ip\langle x\rangle/\hbar)$ 相位。当然，它不再是简谐振子势的定态解，因此要随时间变化。

波函数 $\psi(x,t=0) \equiv \psi(x,0)$ 满足如下的最小不确定关系

$$(\hat{p}-p_0)\psi(x,0) = im\omega(\hat{x}-x_0)\psi(x,0), \tag{3.1.9}$$

即

$$(m\omega\hat{x}+i\hat{p})\psi(x,0) = (m\omega x_0 + ip_0)\psi(x,0). \tag{3.1.10}$$

所以，$\psi(x,0)$ 是算符 $m\omega\hat{x}+i\hat{p}$ 的本征函数，其本征值为 $m\omega x_0 + ip_0$。明显，$\psi(x,0)$ 不是 $\hat{x}$ 或 $\hat{p}$ 的本征函数。因为湮灭算符为

$$\hat{a} = \frac{m\omega\hat{x}+i\hat{p}}{\sqrt{2\hbar m\omega}}, \tag{3.1.11}$$

所以 $\psi(x,0)$ 是湮灭算符 $\hat{a}$ 的本征函数，

$$\hat{a}\psi(x,0) = z_0\psi(x,0) = \frac{m\omega x_0 + ip_0}{\sqrt{2\hbar m\omega}}. \tag{3.1.12}$$

注意到 $z_0$ 就是标记经典振子在相空间中位置的参数。这意味着，波包 $\psi(x,0)$ 的中心在相空间中 $(m\omega x_0, p_0)$ 处，同时具有和简谐振子基态相同的不确定关系。参见图形3.1的中间图形。

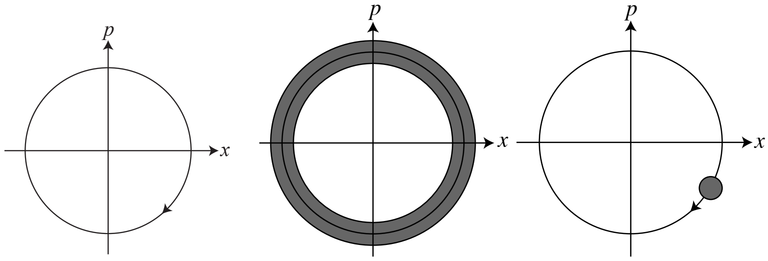


图 3.1: 左图为经典简谐振子运动；中图和右图显示量子相干态的运动行为。

下面我们讨论 $\psi(x,0)$ 随时间的演化行为。为记述方便，我们使用 $\psi(x_0,p_0)$ 表示 $\psi(x,t=0)$，其中我们显式地写出 $t=0$ 时刻的最小不确定波包的坐标和动量的平均值。在简谐振子势中，波函数随时间的演化行为由哈密顿算符控制，具体形式如下

$$\psi(x,t)=e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(x_0,p_0). \tag{3.1.13}$$

下面我们详细说明 $\psi(x,t)$ 仍然是湮灭算符 $\hat{a}$ 的本征函数，从而始终处于最小不确定关系状态。我们首先证明

$$e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{a}e^{-i\hat{H}t/\hbar}=\hat{a}e^{-i\omega t}. \tag{3.1.14}$$

设 $\hat{H}$ 的本征函数 $\phi_n(x)$，

$$\hat{H}\phi_n(x)=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\phi_n(x). \tag{3.1.15}$$

则湮灭算符 $\hat{a}$ 在两个本征函数之间非零矩阵元为

$$\begin{aligned}(\phi_m(x,t),\hat{a}\phi_n(x,t)) &= e^{i(m+\frac{1}{2})\hbar\omega t/\hbar}(\phi_m,\hat{a}\phi_n)e^{-i(n+\frac{1}{2})\hbar\omega t/\hbar}\\ &= (\phi_{n-1},\hat{a}\phi_n)e^{-i\omega t}.\end{aligned} \tag{3.1.16}$$

又因为 $\hat{H}$ 的本征函数构成一个完备集，所以我们有

$$e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{a}e^{-i\hat{H}t/\hbar}=\hat{a}e^{-i\omega t}. \tag{3.1.17}$$

将湮灭算符 $\hat{a}$ 作用在 $\psi(x,t)$ 上可得

$$\begin{aligned}\hat{a}\psi(x,t) &= \hat{a}e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(x_0,p_0)\\ &= e^{-i\hat{H}t/\hbar}\left(e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{a}e^{-i\hat{H}t/\hbar}\right)\psi(x_0,p_0)\\ &= e^{-i\hat{H}t/\hbar}e^{-i\omega t}\hat{a}\psi(x_0,p_0)\\ &= e^{-i\hat{H}t/\hbar}e^{-i\omega t}z_0\psi(x_0,p_0)\\ &= e^{-i\omega t}z_0e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(x_0,p_0)\\ &= e^{-i\omega t}z_0\psi(x,t).\end{aligned} \tag{3.1.18}$$

故而，$\psi(x,t)$ 仍然是 $\hat{a}$ 的本征函数，其本征值为

$$z(t)=z(0)e^{-i\omega t}, \tag{3.1.19}$$

即

$$\frac{m\omega\langle\hat{x}\rangle_t+i\langle\hat{p}\rangle_t}{\sqrt{2\hbar m\omega}}=\frac{m\omega x_0+ip_0}{\sqrt{2\hbar m\omega}}e^{-i\omega t}. \tag{3.1.20}$$

这意味着，在 $t$ 时刻的波包仍然满足最小不确定关系，同时波包中心（坐标和动量平均值）随时间的变化行为满足经典振子的相空间轨道，

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}\rangle_t &= x_0\cos\omega t+\frac{p_0}{m\omega}\sin\omega t,\\ \langle\hat{p}\rangle_t &= p_0\cos\omega t-m\omega x_0\sin\omega t.\end{aligned} \tag{3.1.21}$$

这样我们就得到了薛定谔的经典简谐振子的最佳量子描述——相干态。

关于相干态的进一步讨论，请参考程檀生老师教课书的第 3 章。值得指出的是：相干态彼此是不正交的，但这组相干态是完备的。还可以证明，本征值为实数的相干态是受迫振动的基态。