

分数薛定谔方程下高斯波包的演化及干涉行为

陆岳锋

2021 年 3 月 23 日

1 分数量子力学

- 费曼的路径积分
- Laskin 和他的分数量子力学

2 分数量子力学方程下的波包演化理论计算及数值模拟

- $\alpha = 1, k_0 = 0$ 的解析解
- 数值解

3 结果画图

- 单个波包演化
- 两个波包演化（干涉）

费曼的路径积分

“分形”一词是由 Mandelbrot[1] 引入科学家的词典中的。从历史上看，第一个物理对象的例子是布朗运动，其轨迹“路径”是不可微的。在量子物理学中，应用分形概念的第一个成功尝试是费曼路径积分法在量子力学中的应用。费曼在研究最小作用量原理的时候写出了量子力学的路径积分方法 [2]，将非相对论量子力学重新定义为布朗路径上的路径积分。

$$K_F(x_b t_b | x_a t_a) = \int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}_{Feynman} x(\tau) \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} d\tau V(x(\tau)) \right\} \quad (1)$$

式中， $\mathcal{D}_{Feynman} x(\tau)$ 是费曼函数测度。费曼是基于假设粒子的运动是一种布朗运动而最终能得到这个结果的。他的表达式如下，

$$\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}_{Feynman} x(\tau) \dots = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \left(\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m} \right)^{-N/2} \times \prod_{j=1}^N \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \epsilon} (x_j - x_{j-1})^2 \right\} \quad (2)$$

而众所周知，上式能导出标准的量子力学。

LASKIN 和他的分数量子力学

Laskin 基于分形理论提出了该表达式的基于 Lévy 飞行的表达式，如下，

$$\int_{x(t_a)=x_a}^{x(t_b)=x_b} \mathcal{D}_{\text{Laskin}} x(\tau) \dots = \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \left(\frac{iD_\alpha \epsilon}{\hbar} \right)^{-N/\alpha} \prod_{j=1}^N L_\alpha \left\{ \left(\frac{\hbar}{iD_\alpha \epsilon} \right)^{1/\alpha} |x_j - x_{j-1}| \right\} \dots \quad (3)$$

其中 D_α 是广义的“分数量子扩散系数”，他的单位是 $\text{erg}^{1-\alpha} \text{cm}^\alpha \text{sec}^{-\alpha}$ 。
 \hbar 表示普朗克常数， $x_0 = x_a$ ， $x_N = x_b$ ， $\epsilon = t_b - t_a / N$ ，Lévy 函数 L_α 用 Fox 的 H 函数表示 [3][4][5]

$$\begin{aligned} & \hbar^{-1} \left(\frac{D_\alpha t}{\hbar} \right)^{-1/\alpha} L_\alpha \left\{ \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{D_\alpha t} \right)^{1/\alpha} |x| \right\} \\ &= \frac{1}{\alpha |x|} H_{2,2}^{1,1} \left[\frac{1}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{D_\alpha t} \right)^{1/\alpha} |x| \middle| \begin{matrix} (1,1/\alpha), (1, \frac{1}{2}) \\ (1,1), (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right] \end{aligned} \quad (4)$$

分数薛定谔方程 I

明显，在 $\alpha = 2$ 时，Lévy 分布转换为高斯分布。Lévy 飞行过程转换为布朗随机运动。

其中， α 是 Lévy 系数，他的取值范围是 $1 < \alpha \leq 2$ 。而在这样的函数测度下，我们可以像“标准的”路径积分一样推导出标准薛定谔方程和标准的“非分数”量子力学。因此，Feynman-Hibbs 分数背景导致标准的“非分数”量子力学。

但如果把费曼路径积分中的布朗路径换成 Lévy 路径 [5]，（他们所满足的不尝分布不同）。就会出现分数化的薛定谔方程。

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -D_\alpha (\hbar \nabla)^\alpha \psi + V(x)\psi \quad (5)$$

其中，这个 $(\hbar \nabla)^\alpha$ 的运算规则可以用傅立叶变换定义，

$$(\hbar \nabla)^\alpha \psi(x, t) = -\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{i(px/\hbar)} |p|^\alpha \varphi(p, t) \quad (6)$$

分数薛定谔方程 II

这个工作最初是在 2000 年由 Laskin[6][7][8] 提出。分数化的薛定谔方程在形式上是整数薛定谔方程的泛化，但他所包含的物理内容还有待研究。尤其是怎么在实验上观测到分数量子力学不同于整数量子力学的现象，这便是本文研究的重点。

我们现在考虑最简单的高斯波包演化的情况。

一般地

考虑这么一个在 x 空间的波包,

$$\psi(x) = \exp \left[-\sigma (x - x_0)^2 \right] \exp(-ik_0 x) \quad (7)$$

将它变到 k 空间,

$$\frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{\sigma}} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma}} e^{i(k-k_0)(x_0)} \quad (8)$$

在无外势的分数薛定谔方程下, 我们去解这个方程, 发现一些奇特的现象。

$$i \frac{\partial \hat{\psi}}{\partial \xi} + \left(f|k| + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \right) \hat{\psi} = 0 \quad (9)$$

$\alpha = 1, k_0 = 0$ 的解析解

这边直接给出结果：

$$\begin{aligned} \psi(x) = & \frac{\sqrt{\pi} e^{-\sigma(x+f\xi+x_0)^2}}{\sqrt{2}} (1 + \operatorname{erf}(i(x+f\xi+x_0)\sqrt{\sigma})) \\ & + \frac{\sqrt{\pi} e^{-\sigma(x-f\xi+x_0)^2}}{\sqrt{2}} (1 - i \operatorname{erfi}((x-f\xi+x_0)\sqrt{\sigma})) \end{aligned} \quad (10)$$

这就是 $\alpha = 1, k_0 = 0$ 时候的自由波包演化解析解。

数值解

考虑无外势的分数薛定谔方程：

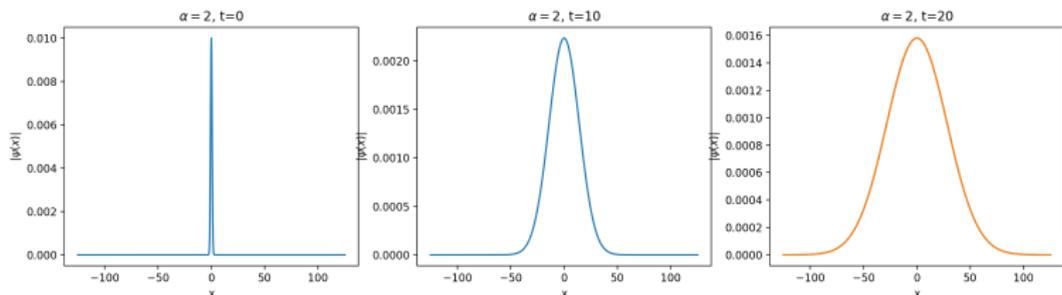
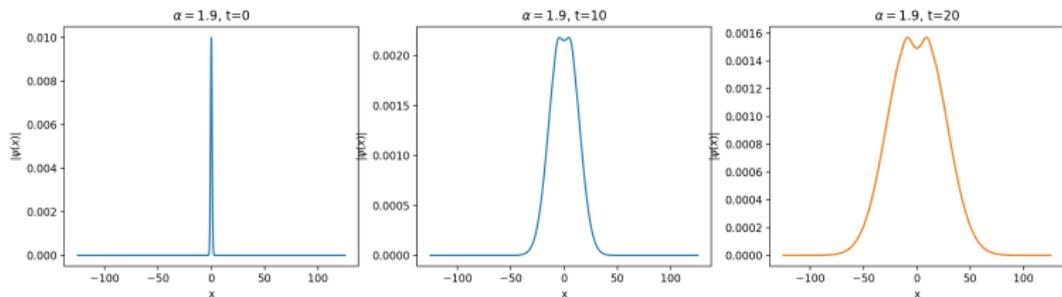
$$i \frac{\partial \psi}{\partial \xi} = -f|k|\psi \quad (11)$$

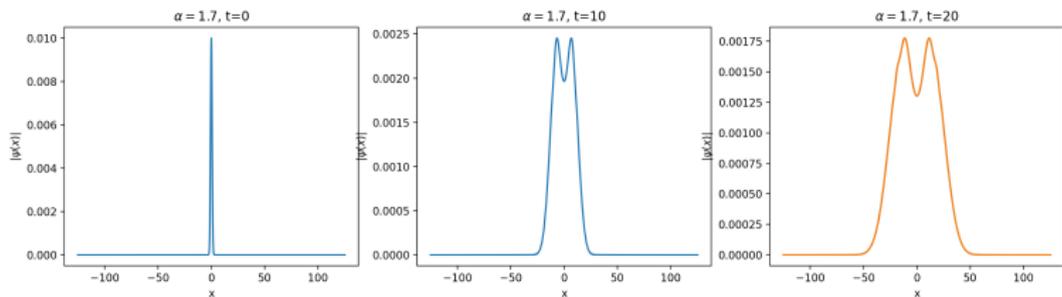
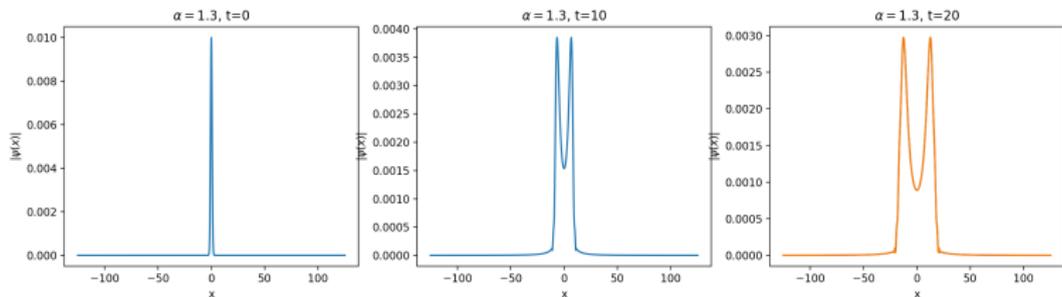
$$\psi = e^{if|k|\xi} \psi(\xi = 0)$$

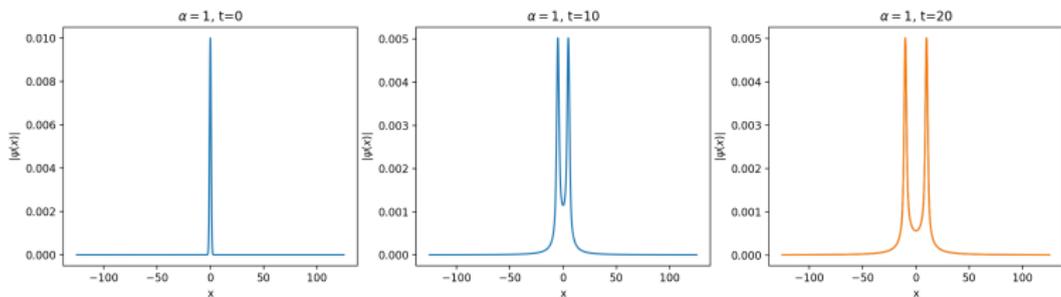
代入初始状态波包的表达式，我们有

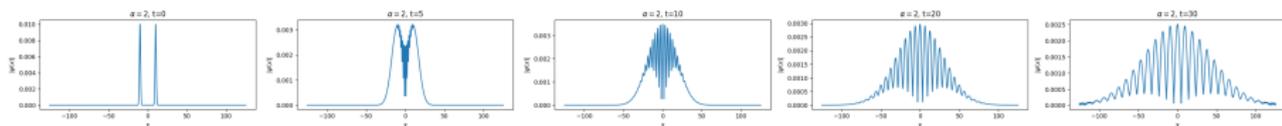
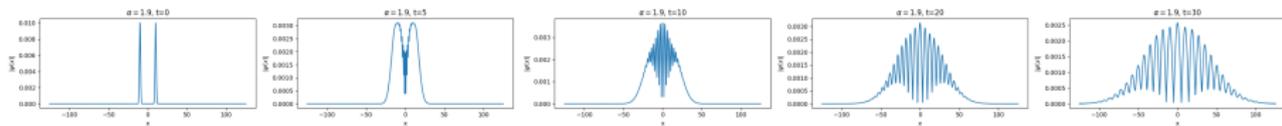
$$\psi = e^{if|k|\xi} \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{\sigma}} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma}} e^{-i(k-k_0)(-x_0)} \quad (12)$$

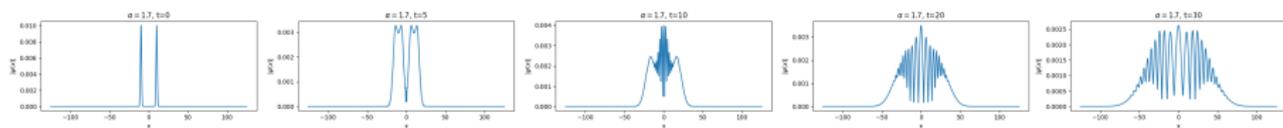
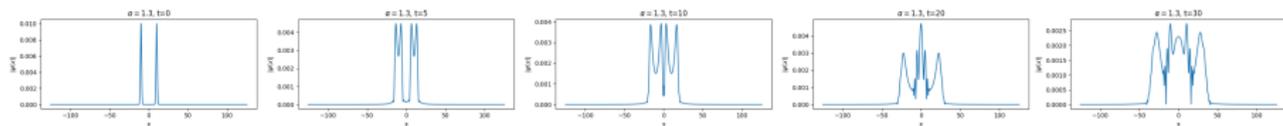
数值方法就是基于式 12，先把这个式子离散化到一个数列上，对那个数列做傅里叶变换，我们就能得到实空间的波函数的样子。

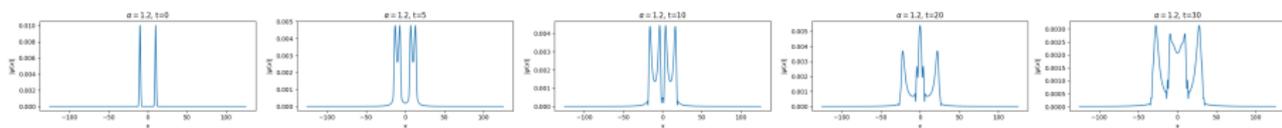
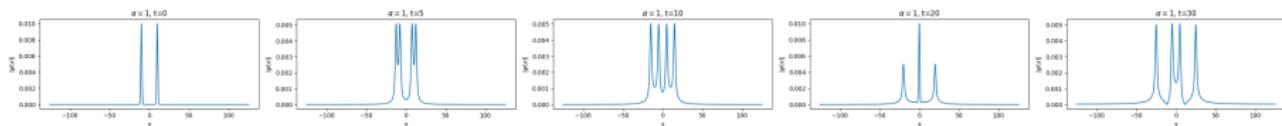
$\psi - x$ 图Figure: $\alpha = 2$ Figure: $\alpha = 1.9$

$\psi - x$ 图Figure: $\alpha = 1.7$ Figure: $\alpha = 1.3$

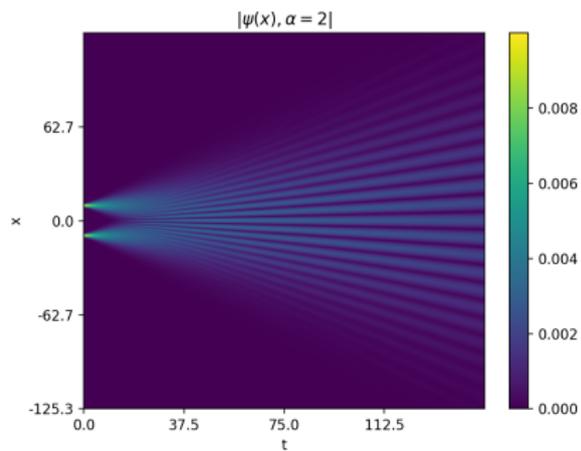
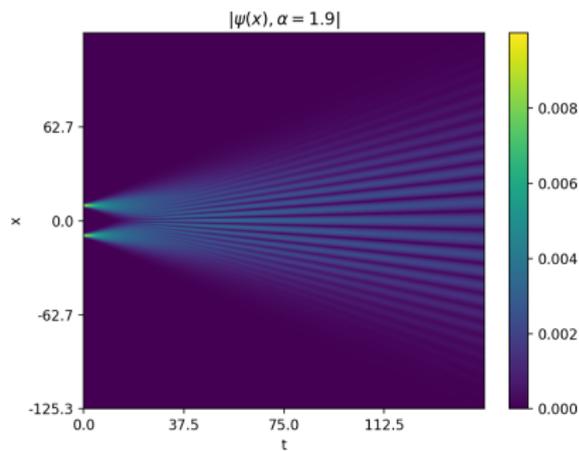
$\psi - x$ 图Figure: $\alpha = 1$

$\psi - x$ 图 IFigure: $\alpha = 2$ Figure: $\alpha = 1.9$

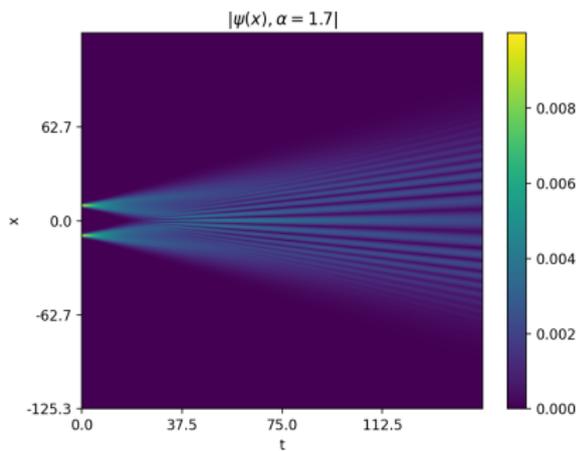
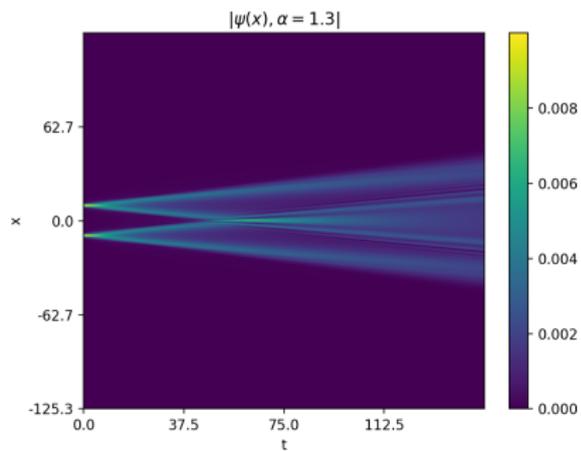
$\psi - x$ 图 IIFigure: $\alpha = 1.7$ Figure: $\alpha = 1.3$

$\psi - x$ 图 IIIFigure: $\alpha = 1.2$ Figure: $\alpha = 1$

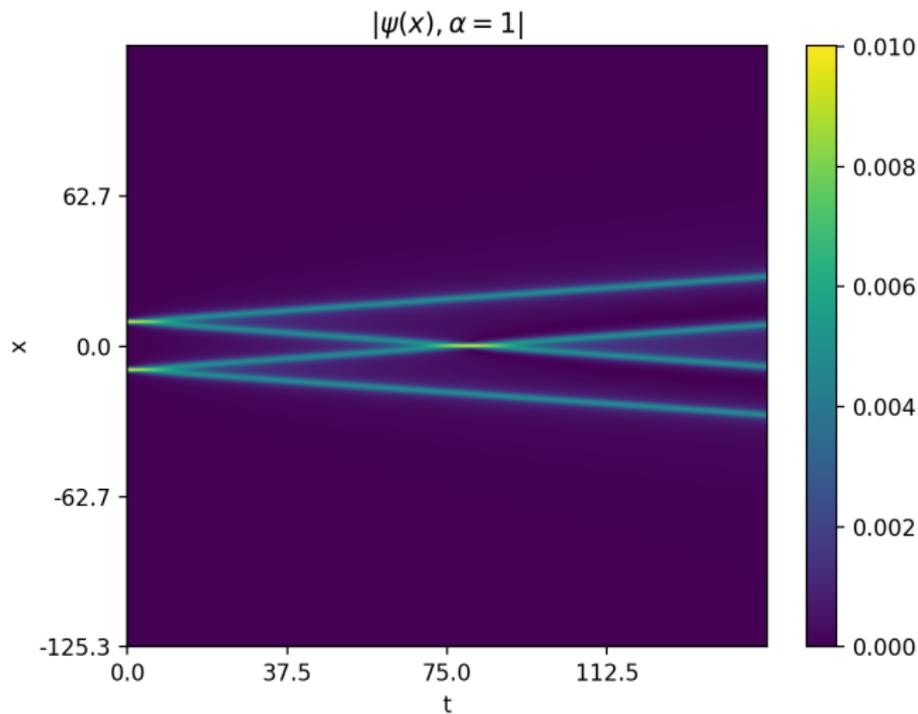
干涉热图

Figure: $\alpha = 2$ Figure: $\alpha = 1.9$

干涉热图

Figure: $\alpha = 1.7$ Figure: $\alpha = 1.3$

干涉热图

Figure: $\alpha = 1$

REFERENCE I



JW Cannon.

The fractal geometry of nature. by benoit b. mandelbrot.
The American Mathematical Monthly, 91(9):594–598, 1984.



Richard P Feynman, Albert R Hibbs, and Daniel F Styer.

Quantum mechanics and path integrals.
Courier Corporation, 2010.



C. Fox.

The and functions as symmetrical fourier kernels.
Transactions of the American Mathematical Society, 98:395–429,
1961.



R. K. Saxena A. M. Mathai.

*The H-function with Applications in Statistics and Other
Disciplines*.
Wiley Eastern, NewDelhi, 1978.

REFERENCE II

-  Bruce J. West, Paolo Grigolini, Ralf Metzler, and Theo F. Nonnenmacher.
Fractional diffusion and lévy stable processes.
Phys. Rev. E, 55:99–106, Jan 1997.
-  Nikolai Laskin.
Fractional quantum mechanics and lévy path integrals.
Physics Letters A, 268(4-6):298–305, 2000.
-  Nick Laskin.
Fractional quantum mechanics.
Physical Review E, 62(3):3135, 2000.
-  Nick Laskin.
Fractional schrödinger equation.
Physical Review E, 66(5):056108, 2002.