

Relativistic De Broglie Matter Wave and Its Application to Dynamic Rabi Flopping in Quantum Transition

Huaiyang Cui

Department of Physics, Beihang University, Beijing
Email: hycui@buaa.edu.cn

Received: May 4th, 2018; accepted: May 21st, 2018; published: May 28th, 2018

Abstract

A new approach is used for extending the De Broglie matter wave to relativistic formalism. The relativistic matter wave expression is obtained, and successfully applied to analyze the dynamic process of Rabi flopping in atomic quantum transition. Under external electromagnetic wave, the electronic probability flow in an atom becomes an alternating current, positively responding to the external electromagnetic wave. In the resonance process, the atomic alternating current absorbs or emits the electromagnetic wave energy by the amount of one photon energy. The resonance condition is just the selection rule. The dynamic evolution curve was calculated by computer simulation.

Keywords

Quantum Transition, Alternating Current, Selection Rule

相对论的德布罗意物质波 及其应用于量子跃迁 Rabi振荡过程

崔怀洋

北京航空航天大学物理系, 北京
Email: hycui@buaa.edu.cn

收稿日期: 2018年5月4日; 录用日期: 2018年5月21日; 发布日期: 2018年5月28日

摘要

使用一种推广德布罗意物质波到相对论中去的新方法，写出了相对论德布罗意物质波的数学表达式。把相对论德布罗意物质波成功地应用于研究一个原子吸收一个光子的Rabi振荡动态过程。在电磁波的作用下，原子内部的电子概率分布会发生动态变化而形成交流电，并与外来电磁波发生共振。在共振过程中，原子吸收或发射一个光子能量的电磁波而完成一次跃迁。共振条件也就成为量子跃迁的选择定则。用计算机模拟了原子量子跃迁从开始到结束的动态过程曲线。

关键词

量子跃迁，交流电，选择定则

Copyright © 2018 by author and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

量子跃迁在很短的时间内完成，通常小于 1 纳秒[1]，人们对此有一个印象：似乎它是瞬间发生的，因而很多人忽视它的物理过程的细节，或者简单地认为物理过程的细节不可描述。爱因斯坦辐射量子理论只讨论辐射跃迁概率之间的关系，是建立在热力学统计平衡基础上的集体模型，它并不具体讨论每一个电子是如何吸收或发射光子。物理教科书中都只讨论量子跃迁的结果和概率[1][2]，缺乏对每个电子的物理过程的深入刻画。原子发射一个光子的时间再短，光子也有一个从无到有的物理过程[3]-[8]，这就是本文要探讨的问题。

本文作者提出了一种推广德布罗意物质波到相对论中去的新方法[3]，写出了相对论德布罗意物质波的数学表达式。本文把相对论德布罗意物质波应用于研究一个原子吸收(或发射)一个光子的物理动态过程。重点讨论电子与光子之间的功能转换过程，从而让人们深入地了解量子跃迁的动力学细节。

2. 相对论的德布罗意物质波

这里简单介绍一下相对论的德布罗意物质波[3]。按照德布罗意的最初表述，物质波是相位波[8]。那么，如图 1，氢原子电子云中的相邻两点 A 和 B 出现的电子应当遵循相同的力学定律而只是运动相位不同。具体来讲，A 点和 B 点的电子四维速度 u_A 和 u_B 都满足相对论牛顿第二定律

$$\begin{aligned} m \frac{du_{A\mu}}{d\tau} &= qF_{\mu\nu}u_{A\nu} \\ m \frac{du_{B\mu}}{d\tau} &= qF_{\mu\nu}u_{B\nu} \end{aligned} \quad (1)$$

四维速度 u_A 和 u_B 之间存在相位差。式中， m 和 q 是电子的静止质量和电荷。也就是说，A 点周围分布着四维速度场。那么，A 点的四维速度可以按照场的概念写成(以下忽略脚标 A)

$$m \frac{du_{\mu}}{d\tau} = m \frac{\partial u_{\mu}}{\partial x_{\nu}} \frac{dx_{\nu}}{d\tau} = mu_{\nu} \frac{\partial u_{\mu}}{\partial x_{\nu}} \quad (2)$$

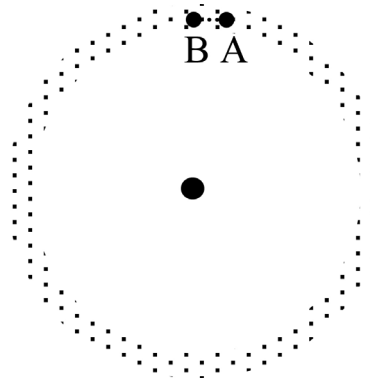


Figure 1. The electrons at A and B in the hydrogen atomic electron cloud are governed by the same dynamics, and different in phase for their matter waves

图 1. 氢原子电子云中的相邻两点 A 和 B 出现的电子应当遵循相同的力学定律而只是运动相位不同

我们注意到，相对论牛顿第二定律(2)式的两边：左边是关于速度场，而右边是关于电磁场，并且可以进一步写成

$$u_\nu \frac{\partial(mu_\mu)}{\partial x_\nu} = qF_{\mu\nu}u_{A\nu} = u_\nu \left[\frac{\partial(qA_\nu)}{\partial x_\mu} - \frac{\partial(qA_\mu)}{\partial x_\nu} \right] \quad (3)$$

这里 A 表示电磁场的四维矢势。移项后，上式成为

$$\begin{aligned} u_\nu \frac{\partial(mu_\mu + qA_\mu)}{\partial x_\nu} &= u_\nu \left[\frac{\partial(qA_\nu)}{\partial x_\mu} - 0 \right] \\ &= u_\nu \left[\frac{\partial(mu_\nu + qA_\nu)}{\partial x_\mu} - \frac{\partial(mu_\nu)}{\partial x_\mu} \right] = u_\nu \frac{\partial(mu_\nu + qA_\nu)}{\partial x_\mu} \end{aligned} \quad (4)$$

其中，我们已经使用了下式的正交性

$$u_\nu u_\nu = -c^2 \quad \text{and} \quad u_\nu \frac{\partial(mu_\nu)}{\partial x_\mu} = 0 \quad (5)$$

至此，我们得到一个非常有意义的结果

$$u_\nu \left[\frac{\partial(mu_\mu + qA_\mu)}{\partial x_\nu} - \frac{\partial(mu_\nu + qA_\nu)}{\partial x_\mu} \right] = 0 \quad (6)$$

和它的特殊解(显而易见的解)

$$\frac{\partial(mu_\mu + qA_\mu)}{\partial x_\nu} - \frac{\partial(mu_\nu + qA_\nu)}{\partial x_\mu} = 0 \quad (7)$$

下面我们只讨论这个特殊解。根据多元微积分的 Green 定理，(7)表明我们可以引入一个势函数 Φ ，设为复数形式的势 $\Phi = -i\hbar \ln \psi$ ，它满足

$$mu_\mu + qA_\mu = \frac{\partial \Phi}{\partial x_\mu} = -i\hbar \frac{\partial \ln \psi}{\partial x_\mu} \quad (8)$$

根据已知的量子波动的实验知识，我们知道这里 \hbar 就是普朗克常数(它应当由实验来确定，而不是推导计算出来)， ψ 就是波函数。上式的积分形式就是

$$\psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x (mu_\mu + qA_\mu) dx_\mu\right) \tag{9}$$

这里，积分是从 x_0 到 x 的任意积分路径(积分路径无关性，见 Green 定理)，这个路径是四维速度场内的数学积分路径而不是粒子运动轨迹；当然，沿粒子运动轨迹计算积分也可以，因为轨迹也在四维速度场内即整个电子云内。本文把(8)式和(9)式中的波函数称为相对论德布罗意物质波[3]。对于一维自由粒子，它就是比较熟悉的德布罗意物质波公式

$$\psi = \exp\left(\frac{ip_x x}{\hbar} - \frac{iEt}{\hbar}\right) \tag{10}$$

要注意，本文的相对论德布罗意物质波与相对论 Dirac 波动方程以及相对论 Klein-Gordon 波动方程没有直接的关系。因为，相对论 Dirac 波动方程的波函数是四分量的，与本文不相符；而相对论 Klein-Gordon 波动方程的波函数需要对时间求两次导数，也与本文不相符。

3. 在电磁波作用下原子内的电子概率变化

相对论德布罗意物质波公式(9)式允许我们沿经典粒子轨道积分来计算物质波相位，这使得它特别适合描述经典圆形轨道或椭圆轨道的电子量子行为。

如果一束激光照射在一个氢原子上，如果频率合适，这个氢原子就会吸收电磁波能量从定态 1 跃迁到定态 2。根据(9)式，定态 1 和定态 2 的德布罗意物质波可以写成

$$\psi_1 = \exp\left(\frac{iJ_1\theta}{\hbar} - \frac{iE_1t}{\hbar}\right) \rightarrow \psi_2 = \exp\left(\frac{iJ_2\theta}{\hbar} - \frac{iE_2t}{\hbar}\right) \tag{11}$$

这里 J 表示定态角动量(常数)； E 表示定态能量(常数)。在量子跃迁过程中，定态 1 和定态 2 的德布罗意物质波共存于一个过渡轨道上，如图 2 所示(示意图)。

$$\psi = a_1 \exp\left(\frac{iJ_1\theta}{\hbar} - \frac{iE_1t}{\hbar}\right) + a_2 \exp\left(\frac{iJ_2\theta}{\hbar} - \frac{iE_2t}{\hbar}\right) \tag{12}$$

$$a_1^2 + a_2^2 = 1 \tag{13}$$

这里 a 表示物质波的振幅。如果氢原子在 1 ns 时间内从基态跃迁到第一激发态，电子在基态轨道上的速度为 2.19×10^6 m/s，波尔半径为 0.529×10^{-10} m，那么按照经典力学，电子将绕原子核旋转约 10^7 次；我们把过渡轨道近似看成一个封闭轨道并且逐渐长大，通过 10^7 次旋转逐渐从定态 1 过渡到定态 2。

在过渡轨道上，电子的概率分布是

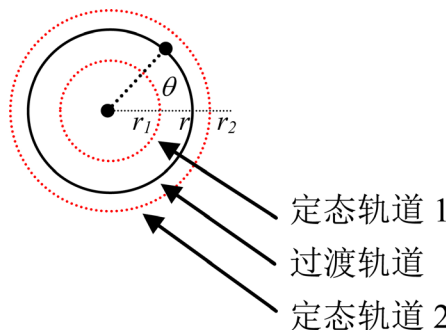


Figure 2. The two matter waves of stationary state 1 and 2 coexist in one interim state
图 2. 定态 1 和定态 2 的德布罗意物质波共存于一个过渡轨道上

$$\psi\psi^* = a_1^2 + a_2^2 + 2a_1a_2 \cos\left(\frac{(J_2 - J_1)\theta}{\hbar} - \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right) \quad (14)$$

这可以理解为一个在过渡轨道上的交流电：原子内的电子概率分布像交流电一样变化。**注意：**它不是半径 r 的函数，而是坐标 θ 的函数，表明过渡轨道长大过程中，任何一个时刻交流电分布具有相同的形态(拓扑同构)。如图 3 所示意。只有过渡轨道上有交流电，定态轨道(因为 $a_1 = 0$ or $a_2 = 0$) 上没有交流电。

根据波动的相长和相消规律，方程(14)式要求这个交流电必须满足选择定则(波动的相长条件)

$$\frac{J_2 - J_1}{\hbar} = k; \quad k = 1, 2, \dots \quad (15)$$

如图 4 所示，只有满足选择定则，定态 1 和定态 2 的德布罗意物质波才能共存于这个过渡轨道上，交流电才能持续在这个过渡轨道上存在。选择定则意味着激光只能激发出与定态 1 能够共存的定态 2，定态 1 和定态 2 在过渡轨道上的交流电将负责与激光耦合；否则，由于波的相消，交流电不存在，原子也就无法与外界激光相耦合。从(14)式可以看出， $k=1$ 的情况等效于一个旋转电偶极子的交流电； $k=2$ 的情况等效于一个旋转电四极子的交流电。 $k=1$ 的情况下，原子交流电与激光共振，能量耦合效率最高，所以实际的量子跃迁的选择定则就是 $k=1$ 的情况。下文我们只讨论 $k=1$ 的情况。

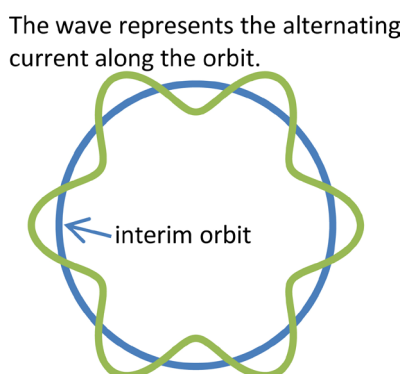


Figure 3. The wave on the orbit represents the electron probability in the interim orbit
图 3. 波形表示 t 时刻沿轨道的概率分布示意图(公式(14)式的交流电分布)

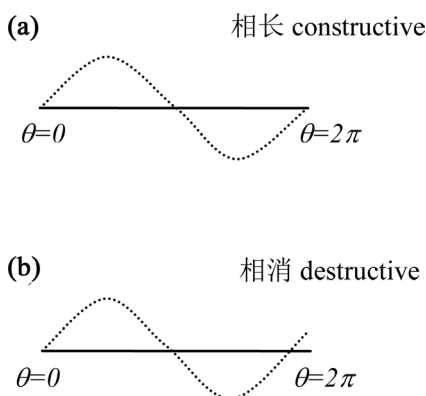


Figure 4. The construction of the alternating current on the orbit allows the current to survive in the interim orbit for k being an integer

图 4. 根据波动的相长和相消规律， k 为整数的情况下交流电才能持续在这个过渡轨道上存在

原子的交流电也可以用概率流公式计算, 即

$$j(\theta, t) = \frac{\hbar}{2im_e} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{r \partial \theta} - \psi \frac{\partial \psi^*}{r \partial \theta} \right) \quad (16)$$

$$= \frac{1}{m_e r} \left[a_1^2 J_1 + a_2^2 J_2 + a_1 a_2 (J_2 + J_1) \cos \left(\frac{(J_2 - J_1)\theta}{\hbar} - \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar} \right) \right]$$

这里 r 是过渡轨道的半径。

4. 量子跃迁过程中的 Rabi 振荡: 功能转换过程

跃迁过程中, 氢原子的电子能量为

$$E = a_1^2 E_1 + a_2^2 E_2 = E_1 + a_2^2 (E_2 - E_1) \quad (17)$$

氢原子的电子能量变化率为激光电场力做功的功率(只在轨道切线方向上做功才有效, 在半径方向上做功无效)

$$\frac{dE}{dt} = v_\theta f_\theta = jeE_\theta = jeE_0 \cos(\omega t - \theta) \quad (18)$$

这里 E_0 是激光贡献的电场强度的振幅, ω 是激光的频率。代入 j , 能量的变化为

$$\frac{dE}{dt} = \frac{eE_0 (a_1^2 J_1 + a_2^2 J_2)}{m_e r} \cos(\omega t - \theta) \quad (19)$$

$$+ \frac{eE_0 a_1 a_2 (J_2 + J_1)}{m_e r} \cos \left(\frac{(J_2 - J_1)\theta}{\hbar} - \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar} + \phi \right) \cos(\omega t - \theta)$$

上式中 ϕ 为电子交流电与激光电场之间的初始相位差。对于交变的电场而言, 方程(19)式右边第一项平均为零, 对氢原子的电子能量没有贡献; 第二项平均不为零, 对氢原子的电子能量有贡献。如果激光满足共振条件, 激光会在过渡轨道上一圈又一圈地加速氢原子的电子。共振条件为

$$\frac{J_2 - J_1}{\hbar} = 1; \quad \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \omega_0 \quad (20)$$

在共振条件下, a_2 会随着时间而增长。我们只需要观察一个地点的能量变化, 设观察地点选在 $\theta = 0$, 为便于与参考文献[9]中的跃迁概率公式进行比较, 初始相位差选 $\phi = 0$, 则

$$\left. \frac{dE}{dt} \right|_{\theta=0} = \frac{eE_0 a_1 a_2 (J_2 + J_1)}{m_e r} \cos(\omega_0 t) \cos(\omega t) \quad (21)$$

把(17)式代入方程(21)式, 我们得到

$$\int_0^{a_2} \frac{2(E_2 - E_1)}{\sqrt{1 - a_2^2}} d(a_2) = \frac{eE_0 (J_2 + J_1)}{m_e r} \int_0^t \cos(\omega_0 t) \cos(\omega t) dt \quad (22)$$

上式中 r 视为缓慢变化量(曾经按照经典力学初步估算过, 电子旋转次数 10^7 数量级, 才逐渐从定态 1 过渡到定态 2), 所以把它放在积分号外。上式有解析解

$$\arcsin a_2 = \frac{eE_0 (J_2 + J_1)}{2(E_2 - E_1) m_e r} \left[\frac{\sin((\omega_0 - \omega)t)}{2(\omega_0 - \omega)} + \frac{\sin((\omega_0 + \omega)t)}{2(\omega_0 + \omega)} \right] \quad (23)$$

实验中激光频率选在共振频率附近 $\omega \approx \omega_0$, 所以上式右边第二项贡献微弱而可以忽略。我们得到

$$\arcsin a_2 = \frac{eE_0(J_2 + J_1)}{4\omega_0\hbar m_e r} \frac{\sin[(\omega_0 - \omega)t]}{\omega_0 - \omega} = \frac{V' \sin[(\omega_0 - \omega)t]}{2\hbar \omega_0 - \omega} \quad (24)$$

量子跃迁的动态过程可以用跃迁概率 $p(t) = |a_2|^2$ 来描写：

$$p(t) = a_2^2 = \sin^2 \left(\frac{V' \sin[(\omega_0 - \omega)t]}{2\hbar \omega_0 - \omega} \right) \quad (25)$$

当 $a_2 = 1$ 的时候，量子跃迁结束。如果继续辐照激光，跃迁概率会从 1 下降，直到零，让后又会增加，如此反复，形成 Rabi 振荡。

如图 5 所示，根据(24)式，我们用计算机模拟了原子量子跃迁的从开始到结束的动态过程曲线。取 $r = (r_1 + r_2)/2$ ，量子跃迁时间 τ 按(24)式计算

$$\frac{eE_0(J_2 + J_1)}{2\omega_0\hbar m_e (r_2 + r_1)} \frac{\sin[(\omega_0 - \omega)\tau]}{\omega_0 - \omega} = \frac{\pi}{2} \quad (26)$$

得到

$$\tau = \frac{1}{\omega_0 - \omega} \arcsin \left(\frac{\omega_0\hbar m_e (r_2 + r_1)(\omega_0 - \omega)}{\pi eE_0 (J_2 + J_1)} \right) \quad (27)$$

在量子跃迁的初级阶段 a_2 很小，我们有近似表达式

$$\begin{aligned} \arcsin a_2 &= \frac{V' \sin[(\omega_0 - \omega)t]}{2\hbar \omega_0 - \omega} \\ &= \frac{V' \sin[(\omega_0 - \omega)t/2]}{\hbar \omega_0 - \omega} \cos[(\omega_0 - \omega)t/2] \end{aligned} \quad (28)$$

为便于与参考文献中的相关公式进行比较，采用数学技巧：当 $\sin \alpha \rightarrow 0$ 时 $\cos \alpha \rightarrow 1$ ，可以略去 $\cos \alpha$ 项，即

$$\sin \alpha = 2 \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} \approx 2 \sin \frac{\alpha}{2} \quad (29)$$

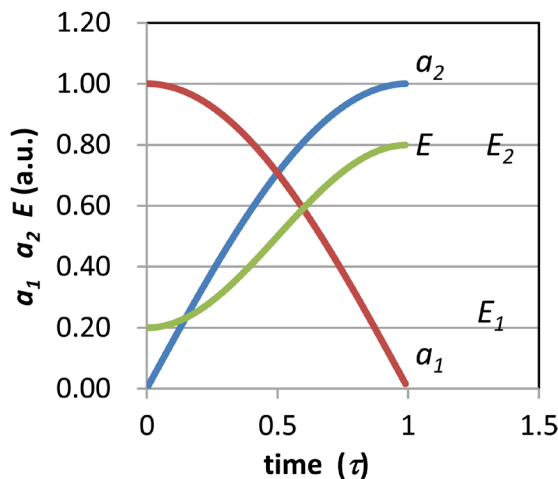


Figure 5. The dynamic evolution curve was calculated by computer simulation, when $a_2 = 1$, the quantum transition finished
图 5. 用计算机模拟了原子量子跃迁的从开始到结束的动态过程曲线。当 $a_2 = 1$ 的时候，量子跃迁结束

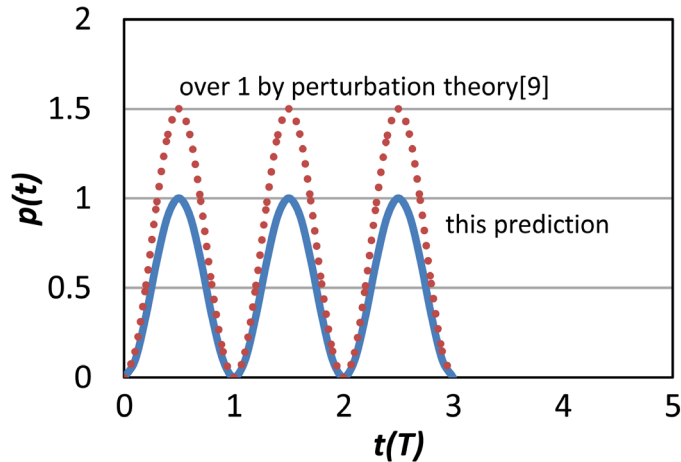


Figure 6. Transition probabilities as time function, probability over 1 predicted by perturbation theory (dash line), the real line represents our prediction

图 6. 跃迁概率 $p(t)$ 与时间 t 的关系曲线，微扰论的跃迁概率 $p(t)$ 公式会超过 1 (虚线)，实线表示本文计算

这样，我们得到与文献[9]中用量子力学微扰论得到的跃迁公式一样的公式：

$$a_2 = \frac{V' \sin[(\omega_0 - \omega)t/2]}{\hbar(\omega_0 - \omega)} \tag{30}$$

$$p(t) = a_2^2 = \frac{V'^2 \sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{\hbar^2(\omega_0 - \omega)^2} \tag{31}$$

由于量子跃迁过程中 a_2 上升得非常快(1 ns 数量级)，所以初级阶段 a_2 (很小)反映了跃迁的一些主要特征，在微扰论可以成立的范围内，本文的跃迁概率公式与文献中的跃迁概率公式相同。可以证明，微扰论的 Rabi 振荡的频率 ω_r 公式[10]为

$$\omega_r = \frac{1}{2} \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \frac{V'^2}{\hbar^2}} \tag{32}$$

应当指出，微扰论推导的跃迁公式中跃迁概率 $p(t)$ 与时间 t 几乎成正比，如果 Rabi 振荡的振幅较大，时间稍长概率就会超过 1，这是不对的，即“1 灾难”，如图 6 所示，通常认为这是微扰论的局限性所致 [9]。而本文用相对论德布罗意物质波推导出的跃迁公式(25)式跃迁概率 $p(t)$ 不会超过 1，这是因为本文推导的公式从一开始就遵循着功能转化关系，所以计算出来的跃迁概率 $p(t)$ 更合理。

5. 结论

使用一种推广德布罗意物质波到相对论中去的新方法，写出了相对论德布罗意物质波的数学表达式。把相对论德布罗意物质波成功地应用于研究一个原子吸收一个光子的 Rabi 振荡动态过程。在电磁波的作用下，原子内部的电子概率分布会发生动态变化而形成交流电，并与外来电磁波发生共振。在共振过程中，原子吸收(或发射)一个光子能量的电磁波而完成一次跃迁。共振条件也就成为量子跃迁的选择定则。用计算机模拟了原子量子跃迁的从开始到结束的动态过程曲线。

参考文献

- [1] Gasiorowicz, S. (2003) Quantum Physics. John Wiley & Sons, 5.
- [2] 曾谨言. 量子力学, 上册[M]. 科学出版社, 1982: 18.

-
- [3] 崔怀洋. 相对论的德布罗意物质波及其应用于 Aharonov-Bohm 效应[J]. 大学物理, 2017, 36(8): 1-4+35.
- [4] Bohm, D. (1952) A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of Hidden Variables. I. *Physical Review*, **85**, 166-179. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.85.166>
- [5] Bohm, D. (1952) A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of Hidden Variables. II. *Physical Review*, **85**, 180-193. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.85.180>
- [6] Einstein, A., Podolsky, B. and Rosen, N. (1935) Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete. *Physical Review*, **47**, 777-780. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.47.777>
- [7] Sanz, A.S. and Borondo, F. (2007) A Quantum Trajectory Description of Decoherence. *The European Physical Journal D*, **44**, 319-326.
- [8] 沈慧川, 译. 德布罗意文选[M]. 北京大学出版社, 2012.
- [9] Griffith, D. (2006) Introduction to Quantum Mechanics. 机械工业出版社, 346. (英文影印).
- [10] Griffith, D. (2006) Introduction to Quantum Mechanics. 机械工业出版社, 348. (英文影印).

知网检索的两种方式:

1. 打开知网页面 <http://kns.cnki.net/kns/brief/result.aspx?dbPrefix=WWJD>
下拉列表框选择: [ISSN], 输入期刊 ISSN: 2161-0916, 即可查询
2. 打开知网首页 <http://cnki.net/>
左侧“国际文献总库”进入, 输入文章标题, 即可查询

投稿请点击: <http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱: mp@hanspub.org