

量子涨落可以在有限温度下增强或减少位置不确定性

Harukuni Ikeda¹

¹Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto 606-8502, Japan

E-mail: harukuni.ikeda@yukawa.kyoto-u.ac.jp

2025 年 4 月 24 日

摘要. 不确定性原理保证了位置不确定性 $\langle \Delta x^2 \rangle > 0$ 的非零值，即使在没有热涨落的情况下也是如此。这表明量子涨落在绝对零度下本质上增强了位置不确定性。一个自然的问题随之而来：在有限温度下会发生什么情况，在这种情况下，量子涨落和热涨落之间的相互作用可能导致复杂且引人入胜的行为？为了解决这个问题，我们系统地研究了被限制在一个非线性势能 $V(x) \propto x^n$ 形式的粒子的位置不确定性 $\langle \Delta x^2 \rangle$ ，其中 $n = 2, 4, 6, \dots$ 表示一个偶数指数。通过路径积分蒙特卡罗模拟，我们将 $\langle \Delta x^2 \rangle$ 作为热德布罗意波长 Λ 的函数来计算其在平衡状态下的值。有趣的是，对于较大的 n 值， $\langle \Delta x^2 \rangle$ 对 Λ 表现出非单调依赖性：它在小 Λ 下随 Λ 的增加而减小，但在更大的 Λ 下则增加。为了进一步理解这种行为，我们采用了一种半经典近似方法，这表明当势能的非线性足够强时，量子涨落可以减少小 Λ 的位置不确定性。最后，我们讨论了这一结果对于强非线性相互作用驱动的多体现象（如玻璃转变）的潜在影响，在这些现象中，过渡密度表现出类似的非单调依赖于 Λ 。

1. 介绍

在一个经典系统中，位置是一个确定性的变量，在没有热波动的情况下，即，位置的不确定性为零， $\langle \Delta x^2 \rangle \equiv \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 0$ 。相比之下，对于一个量子系统，不确定性原理保证了 $\langle \Delta x^2 \rangle > 0$ [1]，这表明量子波动本质上增加了位置的不确定性。在有限温度下的平衡状态下会发生什么？这项研究系统地调查了使用数值和理论方法在平衡状态下量子波动对 $\langle \Delta x^2 \rangle$ 的影响。为了测量量子涨落的相对强度，我们使用系统线性尺寸单位下的热德布罗意波长 L ：

$$\Lambda = \sqrt{\frac{\beta \hbar^2}{mL^2}}, \quad (1)$$

其中 \hbar 表示约化普朗克常数, β 表示逆温度, m 表示粒子的质量, 而 L 表示系统的线性尺寸。

一种朴素的直觉认为, 在固定温度下, 由于隧道效应和零点能 [1], $\langle \Delta x^2 \rangle$ 应随着 Λ 的增加而增加。这种直觉在最简单的情况下是正确的: 一个被限制在谐振子势 $V(x) \propto x^2$ 中的粒子, 其中 $\langle \Delta x^2 \rangle$ 会随着 Λ 的增加单调增加 [2]。然而, 并非所有系统都表现出这种行为, 这一点可以从另一个可解析求解的例子中看出: 一个被限制在硬壁之间的粒子。对于有限温度下的经典粒子, 在墙壁之间的位置分布是均匀的。相比之下, 对于有限的 Λ , 量子效应变得显著。边界条件和波函数的连续性抑制了在墙壁附近找到粒子的概率。因此, $\langle \Delta x^2 \rangle$ 变得小于其经典对应值 ($\Lambda = 0$), 表明量子波动可以抑制位置不确定性。

量子涨落可以抑制位置不确定性这一观察结果相当违反直觉。有趣的是, 在许多体量子系统中也报道了类似的行为。例如, 量子涨落在固相氢分子的旋转自由度上经常减少不确定性, 这稳定了所谓的 II 相 (部分冻结相) [3, 4, 5]。相关现象在结晶化 [6, 7, 8, 9, 10, 11]、玻璃转变 [12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19] 和自旋玻璃转变 [20, 21, 22, 23] 中也被观察到, 在这些过程中, 量子涨落降低了过渡密度。对这些现象的一种直观解释是, 量子涨落有效地增加了粒子的半径, 从而减少了可访问体积并降低了过渡密度 [12, 13]。这种情况类似于一个被硬壁限制的单个粒子的情况, 正如前面描述的那样, 量子涨落阻止了粒子占据靠近墙壁的区域。这实际上减少了可访问体积。

一个重要且自然的问题是: 在什么条件下量子波动会抑制位置不确定性? 为了解答这个问题, 我们系统地研究了一个被限制在一个非线性势场中的粒子, $V(x) \propto x^n$, 其中 $n = 2, 4, \dots$ 表示一个偶数。通过改变 n , 我们可以系统地将函数形式从谐振子 ($n = 2$) 变为硬壁 ($n \rightarrow \infty$)。

我们研究了使用路径积分蒙特卡罗模拟的 $2 < n < \infty$ 模型 [24, 25, 26, 27]。对于弱非线性势 (即, 小 n), $\langle \Delta x^2 \rangle$ 随着 Λ 的增加单调递增, 类似于在谐振子势情况下观察到的行为。有趣的是, 对于较大的 n , $\langle \Delta x^2 \rangle$ 在中等的 Λ 处从其经典值下降, 表明量子波动抑制了位置不确定性。这种效应在硬壁极限 ($n \rightarrow \infty$) 下最为明显, 在那里 $\langle \Delta x^2 \rangle$ 随 Λ 单调递减。为进一步理解这种行为, 我们进行了半经典计算 [24, 28] 以确定量子涨落抑制 $\langle \Delta x^2 \rangle$ 的条件。半经典分析预测, 当 Λ 很小时, $\langle \Delta x^2 \rangle$ 对 $n = 2, 4$ 增加而对 $n > 4$ 减少, 这与数值结果一致。这些发现表明, 当势能强烈非线性时, 量子涨落通常可以在小的 Λ 下抑制位置不确定性。

论文的结构如下。在第 2 节中, 我们介绍了模型。在第 3 节, 我们简要回顾了两个

可以解析求解的情况：谐振子势能和硬壁。在第 4 节中，我们展示了通过路径积分蒙特卡罗模拟获得的数值结果。在第 5 节中，我们提供了从半经典计算得出的分析见解。最后，第 6 节致力于总结和讨论，强调了我们的发现对玻璃转变研究的一些潜在影响。

2. 设置

在本节中，我们介绍模型并定义关键物理量。

2.1. 模型

我们考虑一个在一维中被限制在势能 $V(x)$ 内的粒子。系统的哈密顿量由以下给出：

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad (2)$$

其中势能 $V(x)$ 定义为：

$$V(x) = k \left(\frac{x}{L} \right)^n, \quad (3)$$

这里 $n = 2, 4, 6, \dots$ 表示一个偶数。位置 x 和动量 p 满足正则对易关系 [1]:

$$[x, p] = i\hbar. \quad (4)$$

对于 $n = 2$ ， $V(x)$ 对应于谐振子势，而在极限 $n \rightarrow \infty$ 下，它接近硬壁的情况，如图 1 所示。

为了量化位置不确定性，我们观察平衡时 x 的方差：

$$\langle \Delta x^2 \rangle \equiv \frac{1}{Z} \text{tr} (e^{-\beta H} x^2), \quad Z = \text{tr} e^{-\beta H}, \quad (5)$$

其中 $\beta = 1/(k_B T)$ 是逆温度， k_B 是玻尔兹曼常数。

2.2. 无量纲化

我们引入无量纲变量：

$$\tilde{x} = L^{-1}x, \quad \tilde{p} = \frac{L}{\hbar}p, \quad (6)$$

它们满足交换关系：

$$[\tilde{x}, \tilde{p}] = i. \quad (7)$$

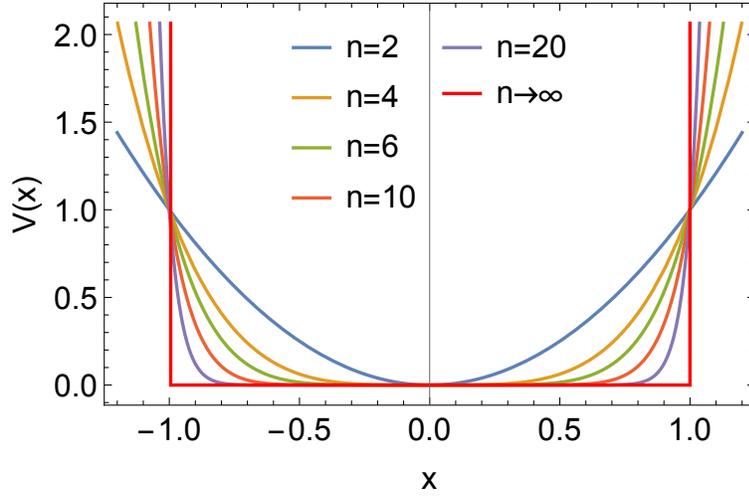


图 1. 几个 n 值的势能。当 $n = 2$ 时，势能是谐振的，在极限 $n \rightarrow \infty$ 下它变得等同于硬壁。为了简单起见，我们在图中设定了 $k = 1$ 和 $L = 1$ 。

利用这些无量纲量，配分函数可以重写为：

$$Z = \text{tr} \exp \left[-\Lambda^2 \frac{\tilde{P}^2}{2} - \tilde{\beta} \tilde{V}(\tilde{x}) \right], \quad (8)$$

其中：

$$\Lambda = \sqrt{\frac{\beta \hbar^2}{mL^2}}, \quad \tilde{\beta} = k\beta, \quad \tilde{V}(\tilde{x}) = |\tilde{x}|^n. \quad (9)$$

无量纲化后，系统由两个控制参数决定：约化的逆温度 $\tilde{\beta}$ 和热德布罗意波长 Λ [2]。

3. 可解情形

这里我们简要回顾一些众所周知的可解情形。

3.1. $n = 2$ （谐振子势）的解析结果

该模型可以解析地求解 $n = 2$ ，其中 $V(x)$ 是一个谐振子势。在这种情况下，平衡分布 \tilde{x} 服从高斯分布 [2, 29]：

$$\rho(\tilde{x}) = \frac{1}{Z} \langle \tilde{x} | e^{-\beta H} | \tilde{x} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi \langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle}} e^{-\frac{\tilde{x}^2}{2 \langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle}}, \quad (10)$$

其中方差由下式给出：

$$\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle = \frac{\Lambda}{2\sqrt{2\tilde{\beta}}} \coth \left(\Lambda \sqrt{\frac{\tilde{\beta}}{2}} \right). \quad (11)$$

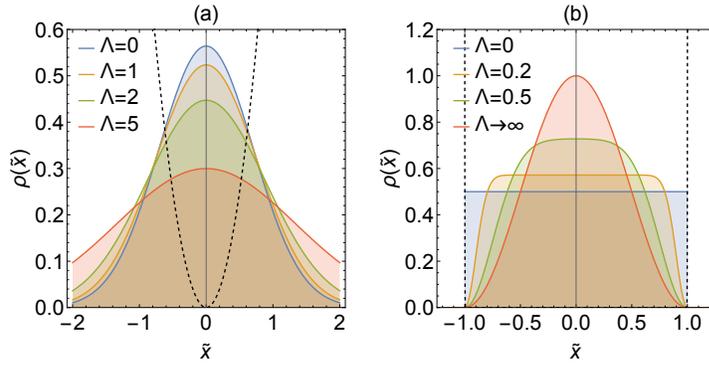


图 2. 平衡分布 $\rho(\tilde{x})$ 对于 $\tilde{\beta} = 1$ 。(a) $\rho(\tilde{x})$ 对于 $n = 2$ (谐振子势)。实线表示各种德布罗意波长 $\Lambda = \sqrt{\frac{\beta \hbar^2}{mL^2}}$ 的 $\rho(\tilde{x})$ ，而黑色虚线表示势 $V(\tilde{x}) = \tilde{x}^n$ 。分布 $\rho(\tilde{x})$ 随着 Λ 的增加而变宽。(b) 对于极限 $n \rightarrow \infty$ (硬壁) 的相同图。在这种情况下，分布随 Λ 增加而变窄。

如图 2 (a) 所示，随着 Λ 的增加，分布 $\rho(\tilde{x})$ 变宽，表明量子涨落增强了位置不确定性。这一结果是意料之中的，因为隧道效应和零点能削弱了势阱施加的约束。在图 3 中，我们用蓝色实线绘制了 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ ，显示出它随 Λ 单调增加。

3.2. 分析结果对于 $n \rightarrow \infty$ (硬壁)

在极限 $n \rightarrow \infty$ 下，该模型对应于粒子被限制在 $\tilde{x} = \pm 1$ 处的硬壁之间。对于经典情况 $\Lambda = 0$ ，平衡分布是均匀的：

$$\lim_{\Lambda \rightarrow 0} \rho(\tilde{x}) = \begin{cases} 1/2 & |\tilde{x}| < 1, \\ 0 & |\tilde{x}| \geq 1, \end{cases} \quad (12)$$

这导致了位置不确定性：

$$\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle_0 = \frac{1}{3}. \quad (13)$$

对于 $\Lambda > 0$ ，平衡分布表示为：

$$\rho(\tilde{x}) = \frac{1}{Z} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{(n\pi\Lambda)^2}{8}} |\phi_n(\tilde{x})|^2, \quad Z = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{(n\pi\Lambda)^2}{8}}, \quad (14)$$

其中 $\phi_n(\tilde{x})$ 表示第 n 个本征函数：

$$\phi_n(\tilde{x}) = \sin\left(n\pi \frac{\tilde{x} - 1}{2}\right). \quad (15)$$

由于边界条件 $\phi_n(\tilde{x} = \pm 1) = 0$ 和波函数的连续性，本征函数的振幅在墙壁附近显著减弱，对于 $|\tilde{x}| \approx 1$ ， $|\phi_n(\tilde{x})| \ll 1$ 。这导致了与经典情况下相比， $\rho(\tilde{x})$ 的分布更窄，如图 2(b) 所示。在极限 $\Lambda \rightarrow \infty$ 下，该分布收敛到基态的分布：

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \rho(\tilde{x}) = \left| \sin \left(\pi \frac{\tilde{x} - 1}{2} \right) \right|^2, \quad (16)$$

这导致了位置不确定性：

$$\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle_{\infty} = \frac{1}{3} - \frac{2}{\pi^2}. \quad (17)$$

在图 3 中，我们将 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle = \int d\tilde{x}, \rho(\tilde{x}) \tilde{x}^2$ 绘制为红色实线。位置不确定性 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 随着 Λ 从 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle_0$ 到 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle_{\infty}$ 单调递减。

4. 数值模拟

对于 $2 < n < \infty$ ，该模型不能解析求解。在本节中，我们展示了这些情况的数值结果。

4.1. 路径积分表述

为了数值上研究该模型，我们使用路径积分形式重新表述划分函数 Z [24, 25, 27, 30]：

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{N}{2\pi\Lambda^2} \right)^{N/2} \left(\prod_{i=1}^N \int d\tilde{x}_i \right) \exp \left[-\tilde{\beta}\Phi(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_N) \right], \quad (18)$$

其中引入了有效势：

$$\Phi(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_N) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{N}{2\tilde{\beta}\Lambda^2} (\tilde{x}_{i+1} - \tilde{x}_i)^2 \cdot \frac{\tilde{V}(\tilde{x}_i)}{N} \right]. \quad (19)$$

物理量 $A(\tilde{x})$ 的热平均可以表示为 [25]：

$$\langle A(\tilde{x}) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle A(\tilde{x}_i) \rangle, \quad (20)$$

其中 $\langle \bullet \rangle$ 表示在有效势 Φ 下平衡构型的热平均。

4.2. 数值实现的细节

我们使用有效势能 Φ 的蒙特卡罗 (MC) 模拟来采样平衡配置 $\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_N$ ，该有效势能在公式 (19) 中给出。单个 MC 步骤涉及对随机选择的 i 进行 N 次局部更新 $\tilde{x}_i \rightarrow \tilde{x}_i + \delta_x$ ，以及质心更新 $R \rightarrow R + \delta_R$ 以加速弛豫。这里， δ_x 和 δ_R 是小的随机数具有

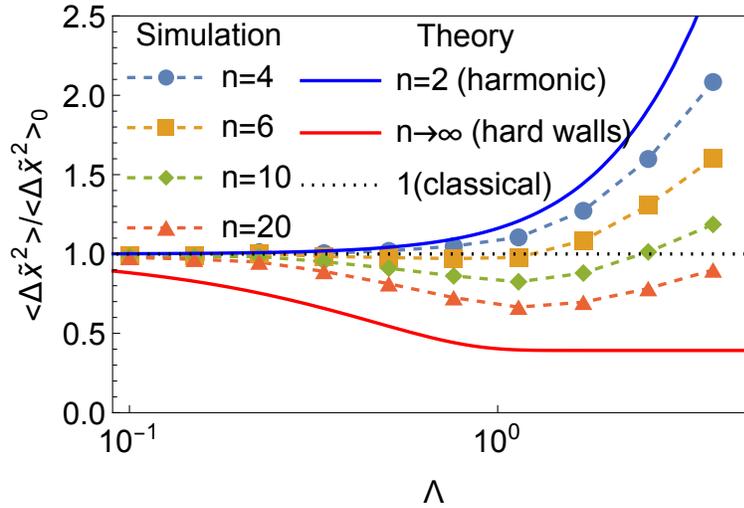


图 3. 热德布罗意波长 $\Lambda = \sqrt{\frac{\beta \hbar^2}{mL^2}}$ 依赖性 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$, 归一化为经典结果 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle_0$ 。这里, 我们设定 $\tilde{\beta} = 1$ 。标记指示数值结果为 $n = 2, \dots, 20$, 实线代表分析结果为 $n = 2$ 和 $n \rightarrow \infty$ 。黑色虚线对应于 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle / \langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle_0 = 1$ 。对于 $n = 2$ 和 4, $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 单调增加, 而对于 $n = 6, 10$ 和 20, $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 在 Λ 较小的情况下减少, 并在 Λ 较大时增加。参见图 5 以查看小 Λ 的数据放大视图。

$\delta_x \in [-0.05\Lambda, 0.05\Lambda]$ 和 $\delta_R \in [-0.05, 0.05]$ 。每次更新被接受的概率为 $\min[1, e^{-\tilde{\beta}\Delta\Phi}]$, 其中 $\Delta\Phi$ 表示由该更新引起的能量变化。在这项研究中, 我们展示了 $N = 50$ 的结果。使用 $N = 100$ 进行的模拟也证实了结果与 N 无关。我们使用 10^7 MC 步骤使系统达到平衡, 然后进行额外的 10^7 步骤来计算 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 的热平均。

4.3. 结果

图 3 总结了我们对各种 n 值的数值结果。对于较小的 n ($n = 2$ 和 4), $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 随 Λ 单调增加, 表明量子波动增强了位置不确定性。相比之下, 对于较大的 n ($n = 6, 10$ 和 20), $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 展现出非单调行为: 它在较小的 Λ 时减少, 在较大的 Λ 时增加。这些结果表明量子波动可以减少小 Λ 的位置不确定性。有趣的是, 之前关于玻璃转变的研究中也报道了类似的非单调行为 [12, 14]。

5. 半经典近似

我们采用半经典近似来获得对大 n 和小 Λ 的非单调行为的物理洞察。值得注意的是, $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 的减少发生在小 Λ 时, 这使我们能够通过分析半经典近似 [24, 15] 中的主要修正项的符号来确定 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 是否减少。

5.1. 配分函数

我们首先将 \tilde{x}_i 分解为中心质量和涨落:

$$\tilde{x}_i = R + u_i, \quad (21)$$

其中 $R = N^{-1} \sum_{i=1}^N \tilde{x}_i$ 表示中心质量, 而 u_i 是围绕它的涨落. 对于 $\Lambda \ll 1$, 波动较小, $|u_i| \ll 1$, 使得可以在 R 周围进行 $\tilde{V}(\tilde{x}_i)$ 的展开. 划分函数然后变为:

$$\begin{aligned} Z \approx & \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{N}{2\pi\Lambda^2} \right)^{N/2} \int dR \prod_{i=1}^N \int du_i \delta \left(N^{-1} \sum_i u_i \right) \\ & \times e^{-\frac{N}{2\Lambda^2} \sum_{i=1}^N (u_{i+1} - u_i)^2 - \tilde{\beta} \tilde{V}(R) - \frac{\tilde{\beta} \tilde{V}''(R)}{2N} \sum_i u_i^2}. \end{aligned} \quad (22)$$

在消去高斯涨落 u_i 后, 划分函数减少到 \sim [24, 28]

$$Z \propto \int dR \exp \left[-\tilde{\beta} \tilde{V}_{\text{eff}}(R) \right], \quad (23)$$

其中有效势由以下给出

$$\tilde{V}_{\text{eff}}(R) = \tilde{V}(R) + \frac{\Lambda^2}{24} \tilde{V}''(R). \quad (24)$$

上述方程意味着质心的分布可以识别为被约束在有效势 Eq. (24) 中的经典粒子, 在半径近似水平上 \sim [24, 28].

5.2. 位置不确定性

位置不确定性可以写为

$$\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle = \langle R^2 \rangle + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle u_i^2 \rangle. \quad (25)$$

方程 (25) 中的第一项被近似为

$$\begin{aligned} \langle R^2 \rangle & \approx \frac{\int dR e^{-\tilde{\beta} \tilde{V}_{\text{eff}}(R)} R^2}{\int dR e^{-\tilde{\beta} \tilde{V}_{\text{eff}}(R)}} \\ & \approx \langle R^2 \rangle_0 - \frac{\Lambda^2}{24} \left[\left\langle \tilde{V}'''(R) R^2 \right\rangle_0 - \left\langle \tilde{V}''(R) \right\rangle_0 \langle R^2 \rangle_0 \right], \end{aligned} \quad (26)$$

其中 $\langle \bullet \rangle_0 = \langle \bullet \rangle|_{\Lambda=0}$ 表示 $\Lambda = 0$ 的经典平衡平均值:

$$\langle \bullet \rangle_0 = \frac{\int dR e^{-\tilde{\beta} \tilde{V}(R)} \bullet}{\int dR e^{-\tilde{\beta} \tilde{V}(R)}}. \quad (27)$$

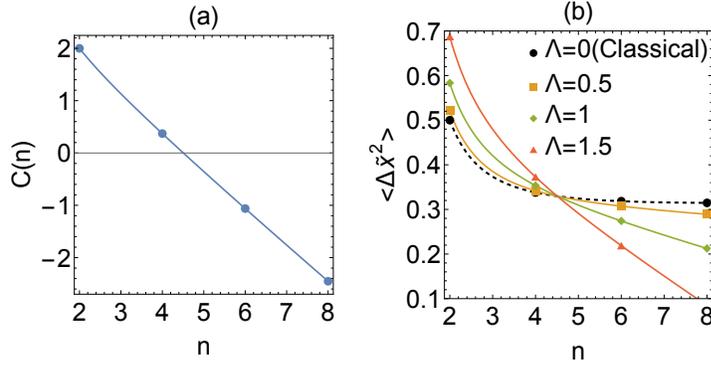


图 4. 半经典近似的结果。(a) 领头阶量子修正的系数, $C(n)$ 。该系数对于 $n = 2$ 和 4 是正的 ($C(n) > 0$), 而对于 $n > 4$ 则是负的 ($C(n) < 0$)。注意 $C(n)$ 是独立于归一化温度 $\tilde{\beta}$ 的。(b) 位置不确定性 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 作为 $\tilde{\beta} = 1$ 关于 Λ 的函数对于 n 的不同值。对于 $n = 2$ 和 4, $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 随着 Λ 的增加而增加, 表明量子波动增强了位置不确定性。相比之下, 对于 $n > 4$, $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 随着 Λ 的增加而减少, 展示了量子波动对位置不确定性的抑制作用。

由于 $\langle \tilde{V}'''(R)R^2 \rangle_0 \geq \langle \tilde{V}'''(R) \rangle_0 \langle R^2 \rangle_0$, 方程 (26) 中的 $O(\Lambda^2)$ 阶项总是给出负的贡献, 从而减少了位置不确定性 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 。请注意, 这一项仅出现在非线性势中, 因为方程 (26) 中的 $O(\Lambda^2)$ 阶项在谐振子势 $\tilde{V}(R) = R^2$ 下消失。方程 (25) 中的第二项计算为 [24]

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle u_i^2 \rangle \approx \frac{\Lambda^2}{12}, \quad (28)$$

这给出了一个正贡献并增强了位置不确定性。由于公式 (26) 和 (28) 中的项之间的竞争, 最低阶贡献在 n 的某个值时改变符号, 这决定了 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 在 Λ 较小的情况下是增加还是减少。

对于势 $\tilde{V}(\tilde{x}) = \tilde{x}^n$, 我们得到

$$\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle \approx \langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle_0 + \frac{\Lambda^2}{24} C(n), \quad (29)$$

其中

$$\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle_0 = \tilde{\beta}^{-2/n} \frac{\Gamma(3/n)}{\Gamma(1/n)}, \quad (30)$$

和

$$\begin{aligned} C(n) &= 2 - \left(\langle \tilde{V}'''(R)R^2 \rangle_0 - \langle \tilde{V}'''(R) \rangle_0 \langle R^2 \rangle_0 \right), \\ &= 2 - n(n-1) \left(\frac{\Gamma(\frac{1+n}{n})}{\Gamma(\frac{1}{n})} - \frac{\Gamma(\frac{3}{n})\Gamma(\frac{n-1}{n})}{\Gamma(\frac{1}{n})^2} \right). \end{aligned} \quad (31)$$

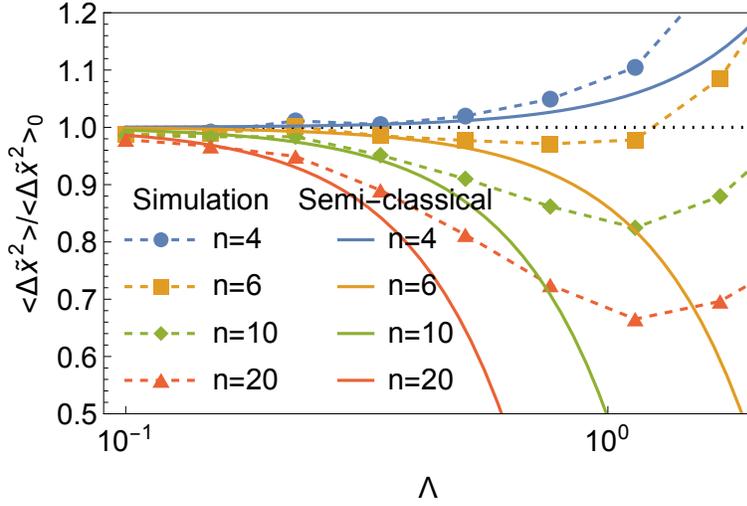


图 5. 数值模拟与半经典计算之间的比较对于 $\tilde{\beta} = 1$ 。标记表示与图 3 中相同的数值结果，而实线表示半经典近似的成果。数值和理论结果在小 Λ 时吻合良好，准确捕捉了 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 的初始趋势。然而，在大 Λ 处结果出现偏差，此时高阶修正变得显著。

如图 4(a) 所示，系数 $C(n)$ 对于 $n = 2$ 和 4 是正的，但对于 $n > 4$ 变为负的。对于 $n = 2$ 和 4，正贡献随 Λ 增加 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ ，表明量子涨落增强了位置的不确定性，如图 4(b) 所示。相比之下，对于 $n > 4$ ，量子涨落抑制了在小 Λ 处的位置不确定性，如图 4(b) 所示。请注意，对于当前模型，这一趋势与温度无关，因为 $C(n)$ 不显式涉及 $\tilde{\beta}$ 。然而，对于更一般的势形，主导阶修正项的符号可能取决于 $\tilde{\beta}$ ，从而引入了可能的温度依赖性。

在图 5 中，我们比较了半经典结果，公式 (29)，与数值结果。半经典近似对于小 Λ 的情况与数值结果吻合良好，特别是在捕捉 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 初始增减方面。然而，对于大 Λ 的情况，高阶修正变得显著，使得半经典近似失效。值得注意的是，半经典计算未能再现对 $n > 4$ 观察到的 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 非单调行为。这是意料之中的，因为半经典近似仅考虑了 $O(\Lambda^2)$ 项，这只能描述 $\langle \Delta \tilde{x}^2 \rangle$ 的单调增或减。需要更高阶的修正来完全解释非单调行为，这部分工作留待未来完成。

6. 总结与讨论

总之，我们研究了量子涨落在非线性势场 $V(x) = kx^n$ 中约束粒子的位置不确定性 $\langle \Delta x^2 \rangle$ 的影响。我们的结果表明，对于足够强的非线性势场和较小的德布罗意波长 Λ ，量子涨落会抑制 $\langle \Delta x^2 \rangle$ 。对于较大的 Λ ，隧道效应占主导地位，导致 $\langle \Delta x^2 \rangle$ 增加，并使得 $\langle \Delta x^2 \rangle$ 对 Λ 的依赖性呈现非单调变化。

我们在单粒子模型中观察到的现象也可能与多体量子系统相关。例如，之前的研

究所报告的量子涨落增强了小 Λ 的结晶 [6, 7, 8, 9, 10, 11] 和玻璃化 [12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19]。这些观测的一个直观解释是量子涨落有效地增加了粒子半径，从而减少了自由体积 [12, 13]。这种机制类似于我们在模型中观察到的行为，在该行为中量子涨落对于足够强的非线性势和小 Λ ，降低了 $\langle \Delta x^2 \rangle$ ，表明粒子在更狭窄区域内被更强地限制，相应地减少了自由体积 \ddagger 。此外，在图 3 中观察到的 $\langle \Delta x^2 \rangle$ 的非单调 Λ 依赖关系，与以往研究 [12] 中报道的玻璃转变点非单调行为相似。这些相似性表明，我们的模型可能为理解玻璃转变研究中观测到的非单调行为提供了一个最小框架 [12, 13]。然而值得注意的是，本研究关注单粒子系统，而玻璃转变涉及多体相互作用。需要进一步研究以建立这些问题之间的更直接关联。

在硬壁极限 ($n \rightarrow \infty$) 下， $\langle \Delta x^2 \rangle$ 随 Λ 的增加单调递减。这种行为与模式耦合理论 (MCT)，一种玻璃转变的动力学平均场理论 [31, 32, 33]，的预测形成对比，该理论表明，即使对于硬球势 [12, 14]，玻璃转变点对 Λ 的依赖性是非单调的。最近，量子硬球在高空间维度限制下的精确计算已经使用复制液体理论 (RLT) 完成 [19]，这是一种关于玻璃转变的静态平均场理论 [34, 35, 36, 37, 38, 39]。RLT 预测随着 Λ 增加，玻璃转变点单调下降，这在定性上与我们在硬壁限制下的发现一致。此外，关于量子硬球结晶的研究一致报告说，转变点随 Λ 增加而单调下降 [6, 7, 8, 9, 10]。这种一致性使我们推测 MCT 预测的量子硬球非单调行为可能是近似的一个结果。进一步研究将有助于阐明这一点。

Acknowledgments

我们感谢 A. Ikeda, M. Udagawa 和 K. Miyazaki 的有益讨论。作者承认使用 OpenAI 的 ChatGPT (<https://chat.openai.com/>) 来帮助提高手稿的清晰度、语法和整体可读性。本工作得到了 KAKENHI 23K13031 的支持。

参考文献

- [1] Greiner W 2011 *Quantum mechanics: an introduction* (Springer Science & Business Media)
- [2] Greiner W, Neise L and Stöcker H 2012 *Thermodynamics and statistical mechanics* (Springer Science & Business Media)
- [3] Kitamura H, Tsuneyuki S, Ogitsu T and Miyake T 2000 *Nature* **404** 259–262
- [4] Hemley R J 2000 *Nature* **404** 240–241

\ddagger 尽管在某些情况下可以将 $\langle \Delta x^2 \rangle$ 解释为粒子的半径，但在这种情况下，将其视为自由体积的度量更为恰当，因为随着粒子可用区域的增加， $\langle \Delta x^2 \rangle$ 也会增长。

- [5] Tsuneyuki S 2002 *Current Opinion in Solid State and Materials Science* **6** 147–151
- [6] Hansen J P, Levesque D and Schiff D 1971 *Phys. Rev. A* **3**(2) 776–780 URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.3.776>
- [7] Runge K J and Chester G V 1988 *Phys. Rev. B* **38**(1) 135–162 URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.38.135>
- [8] Sesé L M 2007 *The Journal of chemical physics* **126**
- [9] Sesé L M and Bailey L E 2007 *The Journal of chemical physics* **126**
- [10] Sesé L M 2013 *The Journal of Chemical Physics* **139**
- [11] Yamashita K, Kwon Y, Koike Y and Hirashima D S 2014 *Journal of the Physical Society of Japan* **83** 043602
- [12] Markland T E, Morrone J A, Berne B J, Miyazaki K, Rabani E and Reichman D R 2011 *Nature Physics* **7** 134 – 137 ISSN 1745-2481 URL <http://dx.doi.org/10.1038/nphys1865>
- [13] Zamponi F 2011 *Nature Physics* **7** 99 – 100 ISSN 1745-2481 URL <http://dx.doi.org/10.1038/nphys1901>
- [14] Markland T E, Morrone J A, Miyazaki K, Berne B J, Reichman D R and Rabani E 2012 *The Journal of Chemical Physics* **136** ISSN 1089-7690 URL <http://dx.doi.org/10.1063/1.3684881>
- [15] Biroli G and Zamponi F 2012 *Journal of Low Temperature Physics* **168** 101–116
- [16] Kinugawa K and Takemoto A 2021 *The Journal of Chemical Physics* **154** ISSN 1089-7690 URL <http://dx.doi.org/10.1063/5.0048539>
- [17] Das A, Rabani E, Miyazaki K and Harbola U 2021 *The Journal of Chemical Physics* **154** ISSN 1089-7690 URL <http://dx.doi.org/10.1063/5.0032085>
- [18] Das A, Krishnan G, Rabani E and Harbola U 2022 *Phys. Rev. E* **105**(5) 054136 URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.105.054136>
- [19] Winer M, Baldwin C L, Barney R, Galitski V and Swingle B 2024 *Phys. Rev. E* **109**(4) 044112 URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.109.044112>
- [20] Foini L, Semerjian G and Zamponi F 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105**(16) 167204 URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.167204>
- [21] Foini L, Semerjian G and Zamponi F 2011 *Phys. Rev. B* **83**(9) 094513 URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.094513>
- [22] Thomson S J, Urbani P and Schiró M 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125**(12) 120602 URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.125.120602>
- [23] Urbani P 2024 *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2024** 083301 ISSN 1742-5468 URL <http://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/ad0635>
- [24] Feynman R P, Hibbs A R and Styer D F 2010 *Quantum mechanics and path integrals* (Courier Corporation)
- [25] Tuckerman M E, Berne B J, Martyna G J and Klein M L 1993 *The Journal of Chemical Physics* **99** 2796 – 2808 ISSN 1089-7690 URL <http://dx.doi.org/10.1063/1.465188>
- [26] Ceperley D M 1995 *Rev. Mod. Phys.* **67**(2) 279–355 URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.67.279>
- [27] Habershon S, Manolopoulos D E, Markland T E and Miller III T F 2013 *Annual review of physical*

- chemistry* **64** 387–413
- [28] Zinn-Justin J 2021 *Quantum field theory and critical phenomena* vol 171 (Oxford university press)
- [29] Schönhammer K 2014 *American Journal of Physics* **82** 887 – 895 ISSN 1943-2909 URL <http://dx.doi.org/10.1119/1.4880096>
- [30] Mittal S, Westbroek M J, King P R and Vvedensky D D 2020 *European Journal of Physics* **41** 055401
- [31] Götze W 1999 *Journal of Physics: condensed matter* **11** A1
- [32] Reichman D R and Charbonneau P 2005 *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2005** P05013
- [33] Götze W 2009 *Complex dynamics of glass-forming liquids: A mode-coupling theory* vol 143 (Oxford University Press, USA)
- [34] Edwards S F and Anderson P W 1975 *Journal of Physics F: Metal Physics* **5** 965 – 974 ISSN 0305-4608 URL <http://dx.doi.org/10.1088/0305-4608/5/5/017>
- [35] Mézard M, Parisi G and Virasoro M A 1987 *Spin glass theory and beyond: An Introduction to the Replica Method and Its Applications* vol 9 (World Scientific Publishing Company)
- [36] Mézard M and Parisi G 1999 *The Journal of chemical physics* **111** 1076–1095
- [37] Charbonneau P, Kurchan J, Parisi G, Urbani P and Zamponi F 2017 *Annual Review of Condensed Matter Physics* **8** 265–288
- [38] Parisi G and Zamponi F 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82**(1) 789–845 URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.789>
- [39] Parisi G, Urbani P and Zamponi F 2020 *Theory of simple glasses: exact solutions in infinite dimensions* (Cambridge University Press)