第 51 卷 第 2 期 2002 年 2 月
1000-3290/2002/51(02)/0201-04

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.51,No.2,February,2002

Heisenberg 对应原理下氢原子 $1/r$ 矩阵元的量子-经典对应*

贾艳伟[1)] 刘全慧[1)†] 彭解华[2)] 王 鑫[1)] 沈抗存[1)2)]

[1)](湖南大学物理系，长沙 410082)

[2)](邵阳师范高等专科学校物理系，邵阳 422000)

(2001 年 7 月 2 日收到；2001 年 8 月 6 日收到修改稿)

通过详细计算表明,在准经典情况下，氢原子 $1/r$ 的矩阵元的量子力学结果与它的 Heisenberg 矩阵元近似相等，在经典极限下，它们相同.

关键词：量子力学，对应原理

PACC：0365，0320

1 引 言

Heisenberg 对应原理的基本表述指的是量子力学矩阵元$\langle\psi_{n+k}(t)|f|\psi_n(t)\rangle$与经典力学量 $f(t)$ Fourier 展开系数 f_k 之间的对应关系[1]

$$\begin{aligned}&\langle\psi_{n+k}(t)\ |f\ |\psi_n(t)\rangle\\&=\langle n+k\ |\ f\ |\ n\rangle\exp[\mathrm{i}(E_{n+k}-E_n)t/\hbar]\\&\approx f_k(n)\exp(\mathrm{i}kw(n)t),\end{aligned}\tag{1}$$

其中 $w(n)$为经典频率，$f_k(n)$，$w(n)$中的经典作用量 J 均用半经典符号 $J=n\hbar$ 记之. $f_k(n)$不妨称为 Heisenberg 矩阵元. Heisenberg 对应原理最初系统表述可见文献[1—3]，与量子力学的相容性可见文献[4]，现代的表述见文献[5,6]. 早期利用 Heisenberg 对应原理主要是用它来量子化经典体系. 后来曾用来计算各种不同势场中量子力学矩阵元，这方面有一篇引用得很多的文章值得一读[3]. 近年来，该原理吸引了广泛的注意[5—8]，主要由于它在量子化经典混沌体系时有很大的优越性，还由于高激发态 Rydberg 原子的研究要求有大量子数时的量子力学的简捷表述.

尽管氢原子的量子力学是量子力学的基石，还少有文章讨论 Heisenberg 对应原理在氢原子的量子-经典对应中的应用问题. 针对氢原子，以前曾有过许多解析[9,10]和数值方法[11]来比较量子力学矩阵元和 Heisenberg 矩阵元. 但有两个问题，1) 在大量子数情况下，一般用量子力学 WKB 近似求得的近似矩阵元，然后和 Heisenberg 矩阵元进行比较. 2)和严格量子力学结果的比较，局限于主量子数的区间不超过 20. 最近，我们通过解析计算解决了氢原子体系中力学量 x,y,z 的矩阵元的经典对应问题，并得到将(1)式从一维推广到了三维的一个新表述[8]. 本文则通过研究力学量 $1/r$ 来研究 Heisenberg 对应原理下氢原子的量子-经典对应.

本文求得经典 Kepler 问题中径向变量倒数即 $1/r$ 的 Fourier 级数展开式，并给出 Heisenberg 矩阵元. 求量子力学矩阵元，并讨论在经典极限下的简化形式.

2 Kepler 问题的经典力学解和 Heisenberg 矩阵元

在球极坐标中，让太阳(原子核)固定在坐标原点，让地球(电子)绕其运动，其轨道为椭圆轨道，

$$r=a(1-e\cos\psi),\tag{2}$$

a 为椭圆的半长轴，e 为偏心率，ψ 为偏近点角(eccentric anomaly)，在 Kepler 问题中，ψ 满足如下 Kepler 方程：

$$wt=\psi-e\sin\psi.\tag{3}$$

* 国家自然科学基金(批准号：19974010)资助的课题.

† 联系人. E-mail：qhuiliu@cs.hn.cn

利用 Bessel-Kapteyn 展开公式将 $(1-e\cos\psi)^{-1}$ 展开，可以得到[12]

$$\frac{1}{r}=\frac{1}{a(1-e\cos\psi)}=\frac{1}{a}\sum_{k=-\infty}^{\infty}J_k(ke)\exp(\mathrm{i}k\omega t),$$
$$J_0(0)=1. \tag{4}$$

它其实就是 $1/r$ 的 Fourier 级数形式.

将第 k 个 Fourier 级数的展开系数 $J_k(ke)/a$ 中的经典力学量用半经典符号加以改写，直接的形式是

$$\frac{J_k(ke)}{(n^2a_0)},\qquad e=\sqrt{1-\frac{l^2}{n^2}}, \tag{5}$$

其中 a_0 为 Bohr 半径，n 为主量子数，l 为角量子数. 要求 $J_k(ke)/n^2a_0$ 和量子力学矩阵元 $\langle n+k,l|1/r|n,l\rangle$ 在主量子数变化的很大的区间内以同样的精度近似相等是不可能的. 故此，以往的讨论总是想方法来调整 Heisenberg 矩阵元中主量子数 n，角量子数 l 的定义,来使它和量子力学矩阵元在 n 较小的区间内符合得较好. 举例说,我们将半经典矩阵元中的主量子数 n 重新定义为 n_c，n_c 或者是 $n+k$ 和 n 的算术平均，或者是 $n+k$ 和 n 的内插值,即

$$n_c=n+\frac{k}{2}{}^{[5,6]}，\text{或者 } n_c=2/\left(\frac{1}{n+k}+\frac{1}{n}\right)^{[2,3]}. \tag{6}$$

将 Heisenberg 矩阵元中的量子数 l 重新定义为 $l_c=l+\frac{1}{2}$ 等等. 由于因为非本文目的,本文不作这样的比较. 由 Heisenberg 矩阵元(5)式和量子力学矩阵元(8)式的比较可知,两者之间相差很大，要定量比较 n_c 和 l_c 的哪一种定义较优，一般要用到数值方法. 我们注意到当量子数 l，n 很大,k 很小时，$n_c\approx n$，$l_c\approx l$，应该能够解析地证明 Heisenberg 矩阵元(5)式和下面给出的量子矩阵元(8)式近似相等. 下一节我们将讨论这一点.

3 量子力学矩阵元及其经典极限

本文要求的量子力学矩阵元为 $\langle n+k,\ l|1/r|n,l\rangle$. 这是一个基本的量子力学量. 历史上曾经很多作者给出过它的结果,但繁简程度相差很大. 吴大猷比较过不同的结果并给出了他自己的表达式[13]，我们认为吴大猷的结果可能是简单的[13]. 下面就介绍并利用他的结果.

氢原子的径向波函数为

$$R_{nl}(r)=\left[\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\right]^{\frac{1}{2}}\cdot l^{-\rho/2}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho), \tag{7}$$

其中 $\rho=\frac{2Z}{na_0}r$，$a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ 为 Bohr 半径. $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ 为 Laguerre 多项式. 吴大猷给出的结果经简化后为

$$\begin{aligned}&\langle n',l|\frac{1}{r}|n,l\rangle\\&=N_{n'l}N_{nl}a_0^2 4^l\frac{(n'n)^{l+2}}{(n'+n)^{2l+2}}(n'+l)!(n+l)!\\&\cdot\sum_{s=0}^{n-l-1}\frac{(-1)^s(n'+l+s)!}{(n-l-s-1)!(n'-n+s)!s!}\\&\cdot\left(\frac{n'-n}{n'+n}\right)^{2s+(n'-n)},\end{aligned} \tag{8}$$

其中 $N_{nl}=\left[\frac{(N-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\right]^{\frac{1}{2}}$ 为归一化系数.

让 $k=n'-n$，则矩阵元为

$$\begin{aligned}&\langle n+k,l|\frac{1}{r}|n,l\rangle\\&=N_{n'l}N_{nl}a_0^2 4^l\frac{(n+k)^{l+2}}{(2n+k)^{2l+2}}(n+l+k)!(n+l)!\\&\cdot\sum_{s=0}^{n-l-1}\frac{(-1)^s(n+l+k+s)!}{(n-l-s-1)!(k+s)!s!}\left(\frac{k}{2n+k}\right)^{2s+k},\end{aligned} \tag{9}$$

下面将(9)式中的量在 $n,l,n-l$ 均为较大数时进行简化. 为此目的，我们先将(9)式的求和中的两个阶乘的商进行简化.

$$\begin{aligned}&\frac{(n+l+k+s)!}{(n-l-s-1)!}\\&=(n+l+k+s)(n+l+k+s-1)\cdots(n-l-s)\\&=\frac{(n+l+k)!}{(n-l-1)!}\prod_{\alpha=1}^{s}(n+l+k+\alpha)(n-l-\alpha)\\&=\frac{(n+l+k)!}{(n-l-1)!}(n^2-l^2)^s\prod_{\alpha=1}^{s}\left(1+\frac{k+\alpha}{n+l}\right)\left(1-\frac{\alpha}{n-l}\right)\\&\approx\frac{(n+l+k)!}{(n-l-1)!}(ne)^{2s}\left[1+\frac{s(2k+s+1)}{2(n+l)}-\frac{s(1+s)}{2(n-l)}\right].\end{aligned} \tag{10}$$

这样，保留至一阶项,(9)式的求和因子近似为

$$\frac{(n+l+k)!}{(n-l-1)!}\frac{1}{(ne)^k}\cdot\sum_{s=0}^{n-l-1}\frac{(-1)^s}{(k+s)!s!}\left(\frac{ke}{2}\right)^{2s+k}[1+\epsilon(k,s)]. \tag{11}$$

其中

$$\epsilon(k,s) = -\frac{k(2s+k)}{2n} + \frac{s(2k+s+1)}{2(n+l)} - \frac{s(s+1)}{2(n-l)}.$$

将(11)式代入(9)式中，则求和因子前的系数为

$$N_{n'l}N_{nl}a_0^2 4^l \frac{(n+k)^{l+2}}{(2n+k)^{2l+2}}(n+l+k)!(n+l)!$$
$$\cdot \frac{(n+l+k)!}{(n-l-1)!}\frac{1}{(ne)^k}$$
$$= \frac{1}{n^2 a_0}\frac{2^{2l+2}}{(ne)^k}\frac{(n+k)^l}{(2n+k)^{2l+2}}$$
$$\cdot \left(\frac{(n+k-l-1)!(n+l+k)!}{(n+l)!(n-l-1)!}\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{12}$$

准确到一阶项，(12)式中根号下的表达式为

$$\frac{(n+k-l-1)!(n+l+k)!}{(n+l)!(n-l-1)!}$$
$$= \prod_{\alpha=1}^{k}(n-l-1+\alpha)(n+l+\alpha)$$
$$= (n^2-l^2)^k\prod_{\alpha=1}^{k}\left(1+\frac{\alpha-1}{n-l}\right)\left(1+\frac{\alpha}{n+l}\right)$$
$$\approx (ne)^{2k}\left(1+\frac{k(k-1)}{2(n-l)}+\frac{(k+1)k}{2(n+l)}\right). \tag{13}$$

这样，(12)式的近似结果为

$$\frac{1}{n^2 a_0}(1+\epsilon'(k)), \tag{14}$$

其中

$$\epsilon'(k) = \frac{k(k-1)}{4(n-l)} + \frac{k(k+1)}{4(n+l)} - \frac{k}{n}.$$

于是，我们发现矩阵元(9)在 $n, l, n-l$ 均较大时为

$$\langle n+k, l \mid \frac{1}{r} \mid n, l\rangle$$
$$= \frac{1}{n^2 a_0}[1+\epsilon'(k)]\sum_{s=0}^{n-l-1}\frac{(-1)^s}{(k+s)!s!}$$
$$\cdot \left(\frac{ke}{2}\right)^{2s+k}(1+\epsilon(k,s)). \tag{15}$$

注意到(15)式中的求和正好是 Bessel 函数之级数表示的前 $n-l-1$ 项，即

$$J_k(z) = \sum_{s=0}^{\infty}\frac{(-1)^s}{(k+s)!s!}\left(\frac{z}{2}\right)^{2k+s}$$
$$= \sum_{s=0}^{N}\frac{(-1)^s}{(k+s)!s!}\left(\frac{z}{2}\right)^{2k+s}$$
$$+ \frac{(-1)^{N+1}}{(k+N+1)!N!}\left(\frac{z}{2}\right)^{2k+N+1}(\beta z), \tag{16}$$

其中 β 是一小于 1 的正数. 当 N 很大时，(16)式后面的项实际上是 Bessel 函数 $J_k(z)$ Taylor 展开式中的 Lagrange 余项. 在 N 较大时，很容易证明其贡献很小. 首先，为了清楚地看出(15)式的意义，我们只准确到零级近似，即为

$$\langle n+k, l \mid \frac{1}{r} \mid n, l\rangle \approx \frac{1}{n^2 a_0}J_k(ke). \tag{17}$$

它正好是我们所希望的结果. 很显然一阶修正项只在 k 和 $n-l$ 可以比拟时起作用. 也就是说，n，l，$n-l$ 较大，而 k 较小时，(17)式近似成立.

4　讨论和结论

一般来说，量子力学的经典对应问题根本不是一个简单的问题. 但有两方面的问题是清楚的. 一是有许多宏观量子现象根本没有经典对应；二是在物理上有意义的(即实验上可观测的)参量(如量子数)的取值范围内，量子力学在长时间、大范围内给出与经典力学相符的结果是根本不可能的，这常常被简而言之为量子力学没有经典极限. 本文支持这些普遍接受的观点.

本文结果可简单总结如下：通过具体计算，我们给出了当 n，l，$n-l$ 较大，k 较小时的 $1/r$ 的氢原子矩阵元. 很清楚地看出它的零级近似即为 Heisenberg 矩阵元. 本文还给出了一级近似的结果. 在经典极限

$$\hbar \to 0,\ n \to \infty,\ l \to \infty,\ n\hbar = J_r,$$
$$l\hbar = J_\varphi,\ (J_r,\ J_\varphi \text{ 有限}) \tag{18}$$

下，对于有限的 k，量子力学矩阵元和 Heisenberg 矩阵元相同. 或者说此时的对应关系转化为同一关系. 这一研究与以前的研究结论[14]一致.

本文作者之一(贾)感谢李侃同学的有益讨论.

[1] Heisenberg W 1949 *The Physical Principles of the Quantum Theory* (Translated by Eckart C and Hoyt F C) (Dover, N Y) p116

[2] Naccache P F 1972 *J. Phys.* B**5** 1308

[3] Percival I C and Richards D 1970 *J. Phys.* B**3** 315, 1035
Percival I C and Richords D 1975 *Adv. At. Mol. Phys.* **11** 1

[4] Landau L D and Lifshitz E M 1965 *Quantum Mechanics* (Pergamon, Oxford)
Liu Q H 1999 *J. Phys.* A**32** L57
Liu Q H *et al* 2002 *J. Math. Phys.* **43** 170

[5] Morehead J J 1996 *Phys. Rev.* A**53** 1285

[6] Kaperkovitz P and Peer M 1998 *J. Phys.* A**31** 2197, 2227

[7] Greenberg W R, Klein A and Li C T 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 1244
Greenberg W R, Klein A, Zlatev I and Li C T 1996 *Phys. Rev.* A**54** 1820

[8] Liu Q H and Hu B 2001 *J. Phys. A: Math. Gen.* **34** 5713

[9] Delone N B, Goreslavsky S P and Krainov V P 1982 *J. Phys.* B**15** L421
Picart J, Edmonds A R and Minh N T 1978 *J. Phys.* B**11** L651

[10] Heim T A, Trautmann D and Baur G 1989 *J. Phys.* B**22** 727

[11] Green L C, Rush P P and Chandler C D 1957 *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **3** 37

[12] Wang Z X and Guo D R 1979 *A General Theory of The Special Functions* (Science Press, Beijing), p272, 460

[13] Wu T Y 1972 *Annual Report of the Institute of Physics* (Academia Sinica, Taiwan) p1

[14] Huang X Y 1986 *Phys. Lett.* A**115** 310
Liu Q H 1990 *Chin. Sci. Bull.* **35** 703
Liu Q H, Wang F B 1991 *Acta Phys. Sin.* **40** 1562 (in Chinese) [刘全慧等 1991 物理学报 **40** 1562]
Liu Q H 1992 *Acta Phys. Sin.* **41** 697 (in Chinese) [刘全慧等 1992 物理学报 **41** 697]
Liu Q H 1993 *Acta Phys. Sin.* **42** 522 (in Chinese) [刘全慧等 1993 物理学报 **42** 522]
Huang X Y *et al* 1993 *Acta Phys. Sin.* **42** 180 (in Chinese) [刘全慧等 1993 物理学报 **42** 180]
Liu Q H 1993 *Acta Physica Sinica* (overseas edition) **5** 241

The quantum-classical correspondence of matrix elements of hydrogen atom's inverse radius in Heisenberg principle*

Jia Yan-Wei[1)] Liu Quan-Hui[1)†] Peng Xie-Hua[2)] Wang-Xin[1)] Shen Kang-Cun[1)2)]

[1)] (*Department of Physics, Hunan University, Changsha* 410082, *China*)

[2)] (*Department of Physics, Shaoyang Advanced Normal School, Shaoyang* 422000, *China*)

(Received 2 July 2001; revised manuscript received 6 August 2001)

Abstract

Explicit calculation shows that the zero order of quantum mechanical matrix elements of hydrogen atom's inverse radius in the quasi-classical case are Heisenberg matrix elements, and the first-order term plays a role when the difference between the principal quantum numbers is large. In the classical limit, quantum mechanical results are identical to Heisenberg ones.

Keywords: quantum mechanics, correspondence principle

PACC: 0365, 0320

* Project Supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19974010).

† Corresponding author. E-mail: qhuiliu@cs.hn.cn