第 57 卷 第 2 期 2008 年 2 月
1000-3290/2008/57(02)/0674-04

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.57,No.2,February,2008

曲面上的动量和动能算符*

刘全慧†

(湖南大学理论物理研究所,长沙 410082)

(2007 年 4 月 14 日收到;2007 年 5 月 15 日收到修改稿)

对约束在曲面上粒子运动的描述可以在内部坐标即曲面局部坐标下进行,也可以在外部坐标即在笛卡尔坐标下进行.在量子力学中,动量和动能算符的表示在这两种描述中各有不同,前者的动量算符仅包含内禀几何量,后者的动量算符包含了曲面的平均曲率.考虑到算符次序问题,动能算符对动量算符的依赖关系也不同,前者的依赖关系仅发现存在一种,后者的依赖关系已经发现有两种.

关键词:量子力学,微分几何

PACC:0365,0240

1. 引 言

量子化是量子力学的基本问题之一.约束在球和非球拓扑形状量子点[1—3]上的电荷运动涉及一个基本理论问题是,曲面上的动量算符如何写?还有一个与之相关联的问题是动能算符对动量算符的依赖关系如何?这些问题的答案要分两种情况.第一种情况是曲面局部曲线坐标下的量子化问题,第二种情况是在笛卡尔坐标下描述曲面上粒子的运动问题.为了文章的完整,本文将简单概述第一种情况下的结果,重点讨论后者.

2. 曲面局部曲线坐标下的量子化问题

曲面局部曲线坐标下的量子化问题的历史几乎和量子力学一样长[4].1928 年 Podolsky 基本上给出了问题的初步答案[4].完善而详尽的处理可以在文献[5]中找到.其基本思想如下:设一个正则的二维曲面 M,在 R^3 中的参数表示为

$$\boldsymbol{r}(u,v)=(x(u,v),y(u,v),z(u,v)). \quad (1)$$

则曲面上的线元为

$$\mathrm{d}s^2\equiv\mathrm{d}\boldsymbol{r}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_\mu\cdot\boldsymbol{r}_v\mathrm{d}x^\mu\mathrm{d}x^v=g_{\mu v}\mathrm{d}x^\mu\mathrm{d}x^v, \quad (2)$$

其中 $\boldsymbol{r}_\mu(\boldsymbol{r}_v)$ 表示 $\boldsymbol{r}$ 对 (u,v) 的导数,$g_{\mu v}=\boldsymbol{r}_\mu\cdot\boldsymbol{r}_v$ 为度规张量.在微分几何中,拉丁字母上、下标通常表示局部曲线坐标系,即 $x^\mu(x^v)$ 代指 u,v;希腊字母上、下标通常表示直角坐标,即 $x^i(x^j,x^k)$ 代指 x,y,z.除非另有标明,重复指标表示求和.曲面上的面积元为

$$\mathrm{d}\sigma=\sqrt{g}\,\mathrm{d}u\mathrm{d}v, \quad (3)$$

其中 $g=|g_{\mu v}|$ 为度规张量矩阵表示的行列式.曲面上的 Laplace-Beltrami 算符为[6]

$$\Delta\equiv\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_\mu g^{\mu v}\sqrt{g}\partial_v. \quad (4)$$

利用度规张量及其导数可以构造一个非张量 Γ_μ(称为一次缩并的联络):

$$\Gamma_\mu=\partial_\mu\ln\sqrt{g}. \quad (5)$$

则和局部坐标 x^μ 共轭的广义动量算符为[7]

$$p_\mu=-\mathrm{i}\hbar g^{-1/4}\partial_\mu g^{1/4}=-\mathrm{i}\hbar\left(\partial_\mu+\frac{1}{2}\Gamma_\mu\right). \quad (6)$$

推导(6)式的方法有许多种,最为简洁的方法参见 Pauli 的著作[7].

动能对动量的依赖关系如下[4,5]:

$$\begin{aligned}T&=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\\&=\frac{1}{2m}g^{-1/4}p_\mu g^{1/4}g^{\mu v}g^{1/4}p_v g^{-1/4},\end{aligned} \quad (7)$$

其中的关键因素在于考虑到了算符的次序问题.在经典极限下,它给出正确的经典动能表达式

$$T=\frac{1}{2m}g^{\mu v}p_\mu p_v. \quad (8)$$

* 教育部新世纪优秀人才支持计划(批准号:NCET-04-0762)资助的课题.

† E-mail:qhliu@hnu.cn

3. 笛卡尔动量

在笛卡尔坐标下描述曲面上经典粒子的运动

$$T = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2). \tag{9}$$

在量子力学中,如何写笛卡尔动量算符是一个最近才研究的问题[8−14],下面我们证明一个普适的表达式[13]

$$p_i = -\mathrm{i}\hbar(\partial_i + Hn_i), \tag{10}$$

其中 H 为曲面的平均曲率,n_i 为曲面法向矢量的 i 方向的分量.乘积 Hn_i 不依赖于曲面内的坐标,是一个几何不变量.(10)式的推导如下:设有一个算符 $f = -\mathrm{i}\hbar X_i^\mu \partial_\mu$,设它的厄密共轭算符为 $f^\dagger$,则 $f^\dagger$ 满足

$$\int \phi^* f\psi\sqrt{g}\,\mathrm{d}u\mathrm{d}v = \int (f^\dagger\phi)^*\psi\sqrt{g}\,\mathrm{d}u\mathrm{d}v. \tag{11}$$

考虑如下积分:

$$\begin{aligned}&\int \phi^* f\psi\sqrt{g}\,\mathrm{d}u\mathrm{d}v\\ &= \mathrm{i}\hbar\int\partial_\mu(\sqrt{g}X_i^\mu\phi^*)\psi\,\mathrm{d}u\mathrm{d}v\\ &= \int\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_\mu(\sqrt{g}X_i^\mu\phi)\right)^*\psi\sqrt{g}\,\mathrm{d}u\mathrm{d}v.\end{aligned} \tag{12}$$

其中用到周期边界条件.于是得厄密共轭算符为

$$f^\dagger = -\mathrm{i}\hbar\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_\mu\sqrt{g}X_i^\mu. \tag{13}$$

利用对称化方法构造厄密算符[15],得 f 的厄密化形式为

$$\begin{aligned}F &= \frac{1}{2}(f + f^\dagger)\\ &= -\mathrm{i}\hbar\left(X_i^\mu\partial_\mu + \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_\mu(\sqrt{g}X_i^\mu)\right).\end{aligned} \tag{14}$$

当 $f = -\mathrm{i}\hbar\partial_\mu$ 时,得所谓的正则动量 p_μ,即(6)式.当 $X_i^\mu = (\boldsymbol{r}^\mu)_i$(脚标 i 表示第 i 个分量)时,得

$$\begin{aligned}p_i &= -\mathrm{i}\hbar\left((\boldsymbol{r}^\mu)_i\partial_\mu + \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{g}}\partial_\mu(\sqrt{g}(\boldsymbol{r}^\mu)_i)\right)\\ &= -\mathrm{i}\hbar(\partial_i + H\boldsymbol{n}_i),\end{aligned} \tag{15}$$

其中 H 为曲面的平均曲率,上式的推导要用到关系式[16]

$$\Delta\boldsymbol{r} \equiv \frac{1}{\sqrt{g}}\partial_\mu\sqrt{g}g^{\mu\nu}\boldsymbol{r}_\nu = 2H\boldsymbol{n}. \tag{16}$$

其中 $H\boldsymbol{n}$ 称为平均曲率矢量场[6].

4. 动能对动量的依赖关系

要得到正确的动能算符的表达式,利用笛卡尔动量(15)式可以证明动能对动量的依赖关系至少有两种,一种是

$$T = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{3}\frac{1}{f_i}p_i f_i p_i, \tag{17}$$

另一种是

$$T = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{3}\frac{1}{f_i}p_i f_i^2 p_i\frac{1}{f_i}, \tag{18}$$

其中(17)和(18)式中的因子函数 f_i 都满足:

$$(\boldsymbol{r}^\mu)_i(\partial_\mu \ln f_i) = H\boldsymbol{n}_i.\ (\text{重复 } i \text{ 指标不求和}) \tag{19}$$

在经典极限下,(17)和(18)式回到(9)式.

下面就(17)式给出证明如下.将(10)式代入(12)式有

$$\begin{aligned}&T(-2m/\hbar^2)\\ &= \sum_i\frac{1}{f_i}((\boldsymbol{r}^\mu)_i\partial_\mu f_i + H\boldsymbol{n}_i)((\boldsymbol{r}^\nu)_i\partial_\nu + H\boldsymbol{n}_i)\\ &= \sum_i\left((\boldsymbol{r}^\mu)_i\partial_\mu + H\boldsymbol{n}_i + \frac{1}{f_i}(\boldsymbol{r}^\mu)_i(\partial_\mu f_i)\right)\\ &\quad\times((\boldsymbol{r}^\nu)_i\partial_\nu + H\boldsymbol{n}_i)\\ &= \sum_i((\boldsymbol{r}^\mu)_i\partial_\mu + H\boldsymbol{n}_i + \Xi_i)((\boldsymbol{r}^\nu)_i\partial_\nu + H\boldsymbol{n}_i),\end{aligned} \tag{20}$$

其中

$$\begin{aligned}\Xi_i &\equiv \frac{1}{f_i}(\boldsymbol{r}^\mu)_i(\partial_\mu f_i)\\ &= (\boldsymbol{r}^\mu)_i(\partial_\mu \ln f_i)\ (\text{重复指标 } i \text{ 不求和}).\end{aligned} \tag{21}$$

展开方程(20)有

$$\begin{aligned}&T(-2m/h^2)\\ &= \boldsymbol{r}^\mu\partial_\mu\cdot\boldsymbol{r}^\nu\partial_\nu + \{(2H\boldsymbol{n} + \Xi)\cdot\boldsymbol{r}^\mu\}\partial_\mu\\ &\quad + \{\boldsymbol{r}^\mu\cdot(\partial_\mu H\boldsymbol{n}) + \Xi\cdot H\boldsymbol{n} + H\boldsymbol{n}\cdot H\boldsymbol{n}\},\end{aligned} \tag{22}$$

这个算符要能回到正确的 Laplace-Beltrami 算符 $\Delta \equiv \partial_i\partial_i = \boldsymbol{r}^\mu\partial_\mu\cdot\boldsymbol{r}^\nu\partial_\nu$,(22)式最后一个表达式中的两个花括弧内的项的值必须为零.而第二个花括弧内的项为零就要求

$$\boldsymbol{r}^\mu\cdot(\partial_\mu H\boldsymbol{n}) + \Xi\cdot H\boldsymbol{n} + H^2 = 0 \tag{23}$$

成立,利用 Weingarten 公式 $\boldsymbol{n}_\mu \equiv \partial_\mu\boldsymbol{n} = -b_{\mu\nu}\boldsymbol{r}^\nu$[6]和公式 $H = g^{\mu\nu}b_{\mu\nu}/2$,可得

$$\boldsymbol{r}^\mu\cdot(\partial_\mu H\boldsymbol{n}) = H\boldsymbol{r}^\mu\cdot(\partial_\mu\boldsymbol{n}) = -2H^2, \tag{24}$$

即方程(23)式的左边可以化为

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{r}^\mu\cdot(\partial_\mu H\boldsymbol{n}) + \Xi\cdot H\boldsymbol{n} + H^2\\ &= \Xi\cdot H\boldsymbol{n} - H\boldsymbol{n}\cdot H\boldsymbol{n}\\ &= (\Xi - H\boldsymbol{n})\cdot H\boldsymbol{n}.\end{aligned} \tag{25}$$

这个式子为零当且仅当 $\Xi - H\boldsymbol{n}$ 为零或垂直于法向量 $\boldsymbol{n}$,即

$$\Xi = Hn + G_\alpha r^\alpha, \tag{26}$$

其中 G_α 为任意函数.不过,(22)式中第一个花括弧内的项为零要求 Ξ 平行于切平面的分量必须为零.考虑到 r^α 和 $n = r^\mu \times r^\nu / \sqrt{g}$ 垂直和 $g^{\alpha\mu} = r^\alpha \cdot r^\mu$ 的任意性,于是(22)式中第一个花括弧内的项为零直接导致了

$$G_\alpha = 0. \tag{27}$$

最后得到一个简单结果

$$\Xi = Hn. \tag{28}$$

然后可以利用(21)式求出 f_i 的值(参见后面的示例).用同样的方法可证明(18)式中的 f_i 也满足(19)式.

如果动能算符的表达式中没有依赖于 f_i 的项,则

$$\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{\hbar^2}{2m}H^2. \tag{29}$$

它比正确的动能表达式多出一个依赖于平均曲率的项.这说明算符的次序问题必须考虑.

5. 示 例

以球面上的粒子为例,球心在坐标原点的单位球面参数方程为

$$\begin{aligned} r &\equiv (x, y, z) \\ &= (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta), \end{aligned} \tag{30}$$

其中 $\theta \in [0, \pi)$, $\varphi \in [0, 2\pi)$.球面的法向矢量 $n = e_r$,度规张量为

$$\begin{aligned} g_{\mu\nu} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sin^2\theta \end{pmatrix}, \\ g^{\mu\nu} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sin^{-2}\theta \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{31}$$

Laplace-Beltrami 算符为

$$\Delta = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{32}$$

切平面内的基矢量为

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} r^\theta \\ r^\varphi \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} g^{\theta\mu} r_\mu \\ g^{\varphi\nu} r_\nu \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sin^{-2}\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\varphi & \cos\theta\sin\varphi & -\sin\theta \\ -\sin\theta\sin\varphi & \sin\theta\cos\varphi & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\varphi & \cos\theta\sin\varphi & -\sin\theta \\ -\dfrac{\sin\varphi}{\sin\theta} & \dfrac{\cos\varphi}{\sin\theta} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{33}$$

平均曲率 $H = -1$.广义动量算符为

$$p_\theta = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\theta}{2\sin\theta}\right),$$

$$p_\varphi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{34}$$

笛卡尔动量算符为

$$\begin{aligned} \hat{p}_x &= -i\hbar\left(\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \sin\theta\cos\varphi\right), \\ \hat{p}_y &= -i\hbar\left(\cos\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \sin\theta\sin\varphi\right), \\ \hat{p}_z &= i\hbar\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\theta\right). \end{aligned} \tag{35}$$

此时因子函数(f_x, f_y, f_z)满足如下偏微分方程组:

$$\begin{aligned} &\cos\theta\cos\varphi\partial_\theta\ln f_x - \frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\partial_\varphi\ln f_x \\ &+ \sin\theta\cos\varphi = 0, \\ &\cos\theta\sin\varphi\partial_\theta\ln f_y + \frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\partial_\varphi\ln f_y \\ &+ \sin\theta\sin\varphi = 0, \\ &-\sin\theta\partial_\theta\ln f_z + \cos\theta = 0. \end{aligned} \tag{36}$$

这个偏微分方程组的普遍解为

$$\begin{aligned} &F_1\left(\frac{f_x}{\cos\theta}, \sin\varphi\tan\theta\right) = 0, \\ &F_2\left(\frac{f_y}{\cos\theta}, \cos\varphi\tan\theta\right) = 0, \\ &f_z - F_3(\varphi)\sin\theta = 0. \end{aligned} \tag{37}$$

其中 F_1, F_2, F_3 为三个任意函数.它的一组特解为

$$f_x = \sin\theta\sin\varphi, f_y = \sin\theta\cos\varphi, f_z = \sin\theta. \tag{38}$$

6. 结 论

对于约束在二维曲面上的粒子的运动在笛卡尔坐标下描述问题,我们发现发现笛卡尔动量依赖于一个几何不变量——平均曲率.如果我们讨论笛卡尔动量算符(35)式给出的三个厄密算符 p_x, p_y, p_z 的本征值问题,很容易发现它们都只有实的连续谱,这一点看来在物理上是合理的.也就是它们是物理上的厄密算符,但是从数学上严格的意义上,笛卡尔动量算符是否自伴算符还是个问题.

利用笛卡尔动量算符来构造正确的量子力学动能时,必须考虑到算符的次序问题,而且至少有两种不同的次序安排可以满足同样的要求.

对于约束体系,笛卡尔动量没有相应的共轭变量,一般来说不是正则动量.

我们对笛卡尔动量研究开始于 2002 年,开始研究的时候并没有想到会有如此精致的结果存在,从今天看来我们走了一些弯路.从那时起,有许多学生和同事或多或少参加过这个项目的研究和讨论.感谢他们的创造性劳动.

[1] da Casta R C T 1981 *Phys*. *Rev*. A **23** 1982

[2] Cantele G，Ninno D，Iadonisi G 2001 *Phys*. *Rev*. B **64** 125325

[3] Encinosa M，Mott L 2003 *Phys*. *Rev*. A **68** 14102

[4] Podolsky B 1928 *Phys*. *Rev*. **32** 812

[5] Kleinert H 1990 *Path Integrals in Quantum Mechanics*，*Statistics and Polymer Physics* (Singapore：World Scientific) p34—37，p451—453

[6] do Carmo M P 1976 *Differential Geometry of Curves and Surfaces* (New Jersey：Prentice-Hall)

[7] Pauli W 1980 *General Principles of Quantum Mechanics* (Berlin：Springer-Verlag) p40—41

[8] Liu Q H，Liu T G 2003 *Int*. *J*. *Theor*. *Phys*. **42** 2877

[9] Liu Q H，Hou J X，Xiao Y P，Li L X 2004 *Int*. *J*. *Theor*. *Phys*. **43** 1011

[10] Xiao Y P，Lai M M，Hou J X，Chen X W，Liu Q H 2005 *Commun*. *Theor*. *Phys*. **44** 49

[11] Liu Q H 2006 *Int*. *J*. *Theor*. *Phys*. **45** 2167

[12] Lai M M，Wang X，Xiao Y P，Liu Q H 2005 *Commun*. *Theor*. *Phys*. **46** 843

[13] Wang X，Xiao Y P，Liu T G，Lai M M，Rao J 2006 *Commun*. *Theor*. *Phys*. **45** 2509

[14] Liu Q H，Tong C L，Lai M M 2007 *J*. *Phys*. A：*Math*. *Theor*. **40** 4161

[15] Bohm D 1951 *Quantum Theory* (New Jersey：Prentice-Hall)

[16] Ou-Yang Z C，Liu J X，Xie Y Z 1999 *Geometrical Methods in the Elastic Theory of Membranes in Liquid Crystal Phases* (Singapore：World Scientific) p51

The Cartesian momentum and the kinetic operators on curved surfaces *

Liu Quan-Hui†

(*School for Theoretical Physics*，*Hunan University*，*Changsha* 410082，*China*)

(Received 14 April 2007；revised manuscript received 15 May 2007)

Abstract

For describing particles moving on the two dimensional curved surfaces，we can use either the intrinsic local coordinates or the Cartesian coordinates. The representation of the momentum operators differs from each other in these two kinds of coordinates，the former ones depend on the intrinsic geometrical quantities，but the latter case depend on a geometrical invariant，namely the mean curvature. Taking the operator-ordering problem into consideration，the kinetic operator for the former case can be expressed in a possibly unique way，while that for latter case can be expressed in two different ways.

Keywords：quantum mechanics，differential geometry

PACC：0365，0240

* Project supported by the Program for New Century Excellent Talents in University，Ministry of Education，China (Grant No. NCET-04-0762).

† E-mail：qhliu@hnu.cn