

笛卡儿坐标下空间转子体系的双波函数描述

刘 全 慧

湖南大学应用物理系, 长沙 410082

1992年4月13日收到

本文给出了笛卡儿坐标下空间转子体系的双波函数描述, 得到了该坐标下每一个力学量的时间演化方程. 因而我们的描述是完备的. 经典力学运动方程是我们所得演化方程的经典极限. 而通常的量子力学描述是我们描述的统计结果. 本文还表明, 笛卡儿坐标比球坐标能提供更多的物理内容.

PACC: 0365; 0320

一、引 言

在文献[1]中我们给出了球坐标下空间转子体系的双波函数论, 发现无法直接得到空间转子的纬向角变量 φ 和极向角动量 P_θ 的运动方程. 究其原因, 应该归结于球坐标并没有能提供描述物理系统的合适的表象[2].

在量子力学中, 量子化一般总是在笛卡儿坐标下完成, 再经过坐标变换而变换到合适的曲线坐标下的[3]. 因此, 量子力学中的曲线坐标系不像它在经典力学中那样具有独立的地位. 回忆平面转子体系中的 Judge-Lewis 困难[4]及几种避免该困难的方案[5], 最成功的一种就是把角变量 φ 换成 $\cos \varphi$ 和 $\sin \varphi$, 其实质就是回到笛卡儿坐标($x = r_0 \cos \varphi$, $y = r_0 \sin \varphi$). 再如氢原子体系, 如何求角动量 P_θ 的期待都是问题[4], 讨论 $\Delta\theta\Delta P_\theta \geq \hbar/2$ 远不如在笛卡儿坐标下计算 $\Delta x_i \Delta P_i \geq \hbar/2$ ($i = 1, 2, 3$)来得有物理意义[6]. 这些事实提醒我们, 笛卡儿坐标在量子力学中具有特别优越的地位. 本文试图给出笛卡儿坐标下空间转子体系的双波函数描述, 发现笛卡儿坐标的确能比球坐标提供更为丰富的物理内容.

二、笛卡儿坐标下空间转子体系的双波函数论

在双波函数论中, 在量子化的空间转子体系中测力学量 f 时将得值 $\langle f \rangle_{lm}$

$$\langle f \rangle_{lm} = \text{Re} \int d\Omega \Phi^*(\theta, \varphi, t) \hat{f} \Psi_{lm}(\theta, \varphi, t), \quad (1)$$

式中 $\Psi_{lm}(\theta, \varphi, t) = Y_{lm}(\theta, \varphi) \exp[-iE_l(t - t_0)/\hbar]$ 为通常空间转子体系的定态波函

数,相应的能量本征值为 $E_l = l(l+1)\hbar^2/2I$, t_0 为一实参量, $I = \mu r_0^2$ 为转子惯量,波函数 $\phi(\theta, \varphi, t) = \sum_{l,m} \psi_{lm}(\theta, \varphi, t)$ 为双波函数中特有的一个波函数. 双波函数论认为体系具有确定能量 E_l 的状态须由这一波函数及通常的定态波函数 $\psi_{lm}(\theta, \varphi, t)$ 合起来定义.

1) 当 $\hat{j} = \hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$ 时,由(1)式得

$$\begin{aligned}\langle H \rangle_{lm} &= l(l+1)\hbar^2/2I, \\ \langle L^2 \rangle_{lm} &= l(l+1)\hbar^2, \\ \langle L_z \rangle_{lm} &= m\hbar.\end{aligned}\quad (2)$$

2) 当 $\hat{j} = \hat{x} = r_0 \sin \theta \cos \varphi$, $\hat{x}^2 = r_0^2 (\sin \theta \cos \varphi)^2$ 时,(1)式给出

$$\begin{aligned}\langle x \rangle_{lm} &= \frac{r_0}{2} \operatorname{Re} \left\{ (a_{l-m,l} - d_{l+m,l}) \exp \left[-\frac{il\hbar(t-t_0)}{I} \right] \right\} \\ &+ \frac{r_0}{2} \operatorname{Re} \left\{ (c_{l-m,l+1} - b_{l+m,l+1}) \exp \left[\frac{i(l+1)\hbar(t-t_0)}{I} \right] \right\},\end{aligned}\quad (3)$$

式中

$$\begin{aligned}a_{l-m,l} &= \sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l+1)(2l-1)}}, \\ b_{l+m,l+1} &= \sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}, \\ c_{l-m,l+1} &= \sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}, \\ d_{l+m,l} &= \sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l+1)(2l-1)}},\end{aligned}\quad (4)$$

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle_{lm} &= \frac{r_0^2}{4} (a_{l-m,l} c_{l-m-2,l} + b_{l+m,l+1} d_{l+m+2,l+1} + c_{l-m,l+1} a_{l-m+2,l+1} \\ &+ d_{l+m,l} b_{l+m-2,l} - a_{l-m,l} b_{l+m,l} - b_{l+m,l+1} a_{l-m,l+1} \\ &- c_{l-m,l+1} d_{l+m,l+1} - d_{l+m,l} c_{l-m,l}) \\ &+ \frac{r_0^2}{4} \operatorname{Re} \left\{ (a_{l-m,l} a_{l-m-2,l-1} + d_{l+m,l} d_{l+m-2,l-2} \right. \\ &- d_{l+m,l} a_{l-m,l-1} - a_{l-m,l} d_{l+m,l-1}) \\ &\times \exp \left[-\frac{i(2l-1)\hbar(t-t_0)}{I} \right] \Big\} \\ &+ \frac{r_0^2}{4} \operatorname{Re} \left\{ (b_{l+m,l+1} b_{l+m+2,l+2} + c_{l-m,l+1} c_{l-m-2,l+2} \right. \\ &- c_{l-m,l+1} b_{l+m,l+2} - b_{l+m,l+1} c_{l-m,l+2}) \\ &\times \exp \left[\frac{i(2l+3)\hbar(t-t_0)}{I} \right] \Big\}.\end{aligned}\quad (5)$$

3) 当 $\hat{f} = \hat{y} = r_0 \sin \theta \sin \varphi$, $\hat{y}^2 = r_0^2 (\sin \theta \sin \varphi)^2$ 时, (1) 式给出

$$\begin{aligned} \langle y \rangle_{lm} &= \frac{r_0}{2} \operatorname{Re} \left\{ -i(a_{l-m,l} + c_{l+m,l}) \exp \left[-\frac{il\hbar(t-t_0)}{I} \right] \right\} \\ &\quad - \frac{r_0}{2} \operatorname{Re} \left\{ -i(b_{l+m,l+1} + d_{l-m,l+1}) \exp \left[\frac{i(l+1)\hbar(t-t_0)}{I} \right] \right\}, \quad (6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle y^2 \rangle_{lm} &= \frac{r_0^2}{4} (a_{l-m,l} c_{l-m-2} + b_{l+m,l+1} d_{l+m+2,l+1} + c_{l-m,l+1} a_{l-m+2,l+1} \\ &\quad + d_{l+m,l} b_{l+m-2,l} + a_{l-m,l} b_{l+m,l} + b_{l+m,l+1} a_{l-m,l+1} \\ &\quad + c_{l-m,l+1} d_{l+m,l+1} + d_{l+m,l} c_{l-m,l}) \\ &\quad - \frac{r_0^2}{4} \operatorname{Re} \left\{ (a_{l-m,l} a_{l-m-2,l-1} + d_{l+m,l} d_{l+m-2,l-2} \right. \\ &\quad \left. + d_{l+m,l} a_{l-m,l-1} - a_{l-m,l} d_{l+m,l-1}) \right. \\ &\quad \times \exp \left[-\frac{i(2l-1)\hbar(t-t_0)}{I} \right] \left. \right\} \\ &\quad - \frac{r_0^2}{4} \operatorname{Re} \left\{ (b_{l+m,l+1} b_{l+m+2,l+2} + c_{l-m,l+1} c_{l-m-2,l+2} \right. \\ &\quad \left. - c_{l-m,l+1} b_{l+m,l+2} - b_{l+m,l+1} c_{l-m,l+2}) \right. \\ &\quad \times \exp \left[\frac{i(2l+3)\hbar(t-t_0)}{I} \right] \left. \right\}. \quad (7) \end{aligned}$$

4) 当 $\hat{f} = \hat{z} = r_0 \cos \theta$, $\hat{z}^2 = r_0^2 \cos^2 \theta$ 时, (1) 式给出

$$\begin{aligned} \langle z \rangle_{lm} &= r_0 \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)}} \cos \frac{lh(t-t_0)}{I} \\ &\quad + r_0 \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)}} \cos \frac{(l+1)\hbar(t-t_0)}{I}, \quad (8) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle z^2 \rangle_{lm} &= r_0^2 \left[\frac{l^2 - m^2}{(2l)^2 - 1} + \frac{(l+1)^2 - m^2}{[2(l+1)]^2 - 1} \right] \\ &\quad + r_0^2 \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l)^2 - 1}} \cdot \sqrt{\frac{(l-1)^2 - m^2}{[2(l-1)]^2 - 1}} \cos \frac{(2l-1)\hbar(t-t_0)}{I} \\ &\quad + r_0^2 \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{[2(l+1)]^2 - 1}} \cdot \sqrt{\frac{(l+2)^2 - m^2}{[2(l+2)]^2 - 1}} \\ &\quad \times \cos \frac{(2l+3)\hbar(t-t_0)}{I}. \quad (9) \end{aligned}$$

这些结果看上去很复杂, 用下式不难验证其正确性:

$$\langle x^2 \rangle_{lm} + \langle y^2 \rangle_{lm} + \langle z^2 \rangle_{lm} = \langle r^2 \rangle_{lm} = r_0^2. \quad (10)$$

5) 当 $\hat{f} = \hat{p}_x = \frac{1}{r_0} \left(\cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$,

$$\hat{p}_x = \frac{1}{r_0} \left(\cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\sin \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right),$$

$$P_z = -\frac{1}{r_0} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}$$

时,由(1)式可发现下式成立:

$$\langle P_i \rangle_{lm} = \mu \frac{d}{dt} \langle x_i \rangle_{lm} \quad (i = 1, 2, 3). \quad (11)$$

下面讨论经典极限下, 结果(2)–(9)式的简化形式. 注意我们的经典极限的形式是

$$l, m \rightarrow \infty, \hbar \rightarrow 0, e\hbar = \sqrt{2IE}, m\hbar = C \quad (12)$$

式中 E, C 分别为经典的能量和角动量 z 轴分量的值. 为了简洁, 下面的表达式中, 仍用符号 l, m , 但须注意它们不过是可以由(12)式来联系的 E, C 的另一种证法而已.

于是, 在极限(12)式下, 有

$$a_{l-m, l} = c_{l-m, l} = \frac{l-m}{2l}, \quad b_{l+m, l+1} = d_{l+m, l} = \frac{l+m}{2l}. \quad (4a)$$

$$\langle x \rangle_{lm} = -r_0 \frac{m}{l} \cos \frac{l\hbar(t-t_0)}{I}, \quad (3a)$$

$$\langle x^2 \rangle_{lm} = \frac{r_0^2}{2} \frac{m^2}{l^2} \left[1 + \cos \frac{2l\hbar(t-t_0)}{I} \right] = \langle x \rangle_{lm}^2, \quad (5a)$$

$$\langle y \rangle_{lm} = -r_0 \sin \frac{l\hbar(t-t_0)}{I}, \quad (6a)$$

$$\langle y^2 \rangle_{lm} = \frac{r_0^2}{2} \left[1 - \cos \frac{2l\hbar(t-t_0)}{I} \right] = \langle y \rangle_{lm}^2, \quad (7a)$$

$$\langle z \rangle_{lm} = r_0 \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{l^2}} \cos \frac{l\hbar(t-t_0)}{I} \quad (8a)$$

$$\langle z^2 \rangle_{lm} = \frac{r_0^2}{2} \left(\frac{l^2 - m^2}{l^2} \right) \left[1 + \cos \frac{2l\hbar(t-t_0)}{I} \right] = \langle z \rangle_{lm}^2. \quad (9a)$$

很容易验证 (3a), (5a)–(9a) 式为相应力学量的经典运动方程. 亦即若改用 E, C 证之, 则如下方程:

$$x(t) = -r_0 \sqrt{\frac{C^2}{2IE}} \cos \left[\sqrt{\frac{2E}{I}} (t - t_0) \right], \quad (3a)'$$

$$y(t) = -r_0 \sin \left[\sqrt{\frac{2E}{I}} (t - t_0) \right], \quad (6a)'$$

$$z(t) = r_0 \sqrt{1 - \frac{C^2}{2IE}} \cos \left[\sqrt{\frac{2E}{I}} (t - t_0) \right] \quad (8a)'$$

为相应空间坐标的经典运动方程. 且与相应动量的经典运动方程 $P_i(t)$ ($i = 1, 2, 3$) 之间满足经典关系

$$P_i(t) = \mu \frac{dx_i(t)}{dt}. \quad (13)$$

类似地, 我们可建立在极限(12)式下的如下关系:

$$\langle P_i^2 \rangle_{lm} = \langle P_i \rangle_{lm}^2 \quad (i = 1, 2, 3). \quad (14)$$

三、双波函数描述与通常量子力学描述间的联系

对具有确定能量取值 $E_l = l(l+1)\hbar^2/2I$ 和确定的角动量之 z 轴分量的取值 $L_z = m\hbar$ 的球面转子, 通常的量子力学描述认为它处在定态 $\Psi_{lm}(\theta, \varphi, t)$ 上, 且测力学量 f 时总得一期待值 $\bar{f}$

$$\bar{f} = \int d\Omega \Psi_{lm}^*(\theta, \varphi, t) f \Psi_{lm}(\theta, \varphi, t). \quad (15)$$

从双波函数论的角度看, 该期待值不过是我们所给出的运动方程 $\langle f \rangle_{lm}$ 的时间平均值, 即

$$\bar{f} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \langle f \rangle_{lm} dz_0 \text{ (或 } dt), \quad (16)$$

即通常的量子力学描述是我们描述的统计情况, 其统计是在“均匀系综”^[7](对 t_0 求平均)或“时间系综”^[8](对 t 求平均)内进行的。

四、讨论与结论

1. 本工作表明, 在笛卡儿坐标下, 描述空间转子能得到每一个力学量的运动方程, 故而是一种完备的描述。而在球坐标下, 我们无法直接得到 P_θ 和 φ 的运动方程。

2. 双波函数描述不是一种把量子力学回归到经典力学的尝试, 也没有得到那样的结果。注意当 l, m 较小时, 有

$$\langle f^2 \rangle_{lm} \approx \langle f \rangle_{lm}^2, \quad (17)$$

故双波函数论亦不认为微观层次上的粒子是经典的点粒子。

3. 通常量子力学的波包描述亦可以给出经典力学运动方程, 不过只能在统计意义上给出^[9], 因为波包总有能量涨落。即量子力学的经典极限总是经典的统计力学而非经典的质点力学^[10]。

[1] 刘全慧、王发伯, 物理学报, 40(1991), 1562.

[2] J. M. Domingos, M. H. Calderia, *Found. Phys.*, 14(1987), 147.

[3] P. A. M. Dirac, *The principles of quantum mechanics* (Oxford Univ. Oxford, 1958).

[4] D. Judge, J. T. Lewis, *Phys. Lett.*, 5(1963), 190.

[5] D. Carruthers, M. M. Nieto, *Rev. Mod. Phys.*, 40(1968), 411.

[6] V. B. Remak, *Z. Phys.*, 69(1931), 332.

[7] X. Y. Huang, *Sci. Sin. (A)*, 31(1988), 1141.

[8] W. Pauli, *Pauli Lectures on Physics Vol. 4* (MIT Press, Mass, 1973) p. 21.

[9] W. Pauli, *ibid.*, Vol. 5, p. 11.

[10] L. E. Ballentine, *Rev. Mod. Phys.*, 42(1970), 358.

DOUBLE WAVE FUNCTION DESCRIPTION FOR SPACE ROTATOR SYSTEMS IN CARTESIAN COORDINATE

LIU QUAN-HUI

Department of Applied Physics, Hunan University, Changsha 410082

(Received 13 April 1992)

ABSTRACT

In this paper, a complete, so-called double wave function description for space rotator systems in Cartesian coordinate is given. The time evolution equation for every observable in the coordinate is presented. The classical mechanical time evolution equations are found as the classical limit case of the evolution equations. And the conventional quantum mechanical description is yielded in two equivalent statistical cases. Our studies show that the Cartesian coordinate offers more perfect description than the spherical polar one does.

PACC: 0365; 0320