

从氢原子的量子力学到两个新的物理学研究方向

刘全慧

翻开任何一本初等量子力学或者量子化学教材，氢原子的量子力学解是前半部分必须介绍的内容。理工科甚至一些文科学生，都接触过氢原子的束缚态解。有人可能以为氢原子已经研究得很成熟，不再有继续研究的余地。可是近年来，产生了两个新的物理学研究方向，都和氢原子的初等量子力学教学内容相关。这两个方向分别是：从氢原子中的定态环流出发到分子中定态环流的激发和检验研究，和从氢原子量子力学哈密顿量的正确形式出发发现了狄拉克正则量子化方案的一个推广。

一、氢原子中的定态环流与分子环流的实验检验

利用球坐标可以求得氢原子的束缚态解，可得一系列定态和相应能级。然后利用流密度算符可以求氢原子定态流密度的三个分量。结果是径向和子午向的分量为零，而纬向分量非零。进而可求得磁矩的三个分量，结果是只有 z 分量非零，且所得磁矩和轨道角动量 z 分量之比即回转磁比率，和经典力学结果一样。这个问题可称为氢原子

中的定态环流问题。结果的明显形式如下（符号取其通常的含义）：

1. 非零电流密度分量如下：

$$J_{e\varphi} = -\frac{e\hbar m}{\mu r \sin\theta} |\psi_{nlm}|^2;$$

2. 非零磁矩分量如下：

$$M_z = -\frac{e}{2\mu} L_z。$$

中外教材中常常涉及这个问题。例如德国经典教材：Greiner, W. Quantum Mechanics: An Introduction, 4th. ed. (Springer, Berlin) pp. 228 ~ 230; 周世勋《量子力学教程》第2版（高等教育出版社，2009）第三章，习题3、4；等等。2007年前后，对这个问题的研究开始走向深入。

首先讨论一个困扰初学者的概念性问题：定态是个稳恒态，也就是在任何意义下都不随时间演化，而非零电流密度意味着电子在运动，二者是否矛盾？分析如下。

如果把非零电流密度理解为氢原子外面的电子绕 z 轴作一圈一圈的圆周运动，好像整个电子云在绕着 z 轴转动一样，是不对的。正统量子力学不容许进行这样的分析或者经典类比。对于量子力学定

态，没有更加基本层次上的运动！任何试图在更加基本层次上的运动分析定态中的可能运动，例如巴伦坦（Ballentine）的量子力学统计解释，都不是正统量子力学范围内的事情。由于量子力学可以得到任何可能与实验检验的物理结果，所以量子力学界流行如下一种说教：

“Shut up and calculate!”（闭嘴且算将起来！）这种说法其实是对量子力学初学者的一个建议，根本不是说量子力学试图回避任何追问。不过在量子力学中，追问只能在量子力学框架内进行。不容许借助经典力学的概念体系、图像甚至分析方法。

一个有趣的问题是：不要以为经典图像总是不对。在能级比较高的情况，准经典计算常常有效。也就是说，准经典要注意适用范围。

定态环流也是环流，全空间会产生磁场，这就是产生磁矩的原因。这个环流在氢原子核上将产生多大的磁场呢？这个计算是柏林自由大学的青年学者巴斯（Barth）和他的导师曼兹（Manz）在2007年完成的。

这些都是理论物理，还不是物理理论。理论物理研究基础性和

国家自然科学基金资助项目(11175063)，湖南大学教改基金资助项目。

原理性问题。例如指出某个物理量或者物理规律在原理上是否可能存在，这需要突破。而物理理论，研究在何种实际系统观测到相关效应的可能性，这常常也非常困难。一个被证明永远无法达到物理理论的理论物理问题，往往生命力不强。

如何检测这个电子环流？氢原子至少需要第一激发态才能产生这个环流，而产生第一激发态需要 10.2 eV 能量而又不至于离解氢原子，所以实现起来非常难。激发分子中的定态电子环流只需要 1 eV 左右的能量，巴斯和曼兹于 2006 年首先建议可用飞秒圆偏振激光在镁卟啉分子中激发出电子激发态，而这种激发态中存在环流，如图 1、图 2 所示。

由于使用到飞秒激光技术，镁卟啉分子停留在任何定态上的时间非常短暂。2012 年加州大学罗德

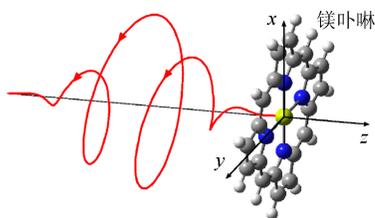


图 1 飞秒圆偏振激光激发电子环流，红线为激光电场矢量在空间转动的轮廓线。当分子平面和激光行进方向平行，且圆偏振激光中的电场分量合适时，当分子中的电子将激发到某个激发态

里格斯 (Rodriguez) 和穆卡莫尔 (Mukamel) 分析了在类似实验上观测到了这个效应的可能性，结论是完全可行。这个技术已经申请专利。

由此我们看到，一个理论物理问题就完成了到物理理论，而下一步将是飞跃到实验物理甚至实际应

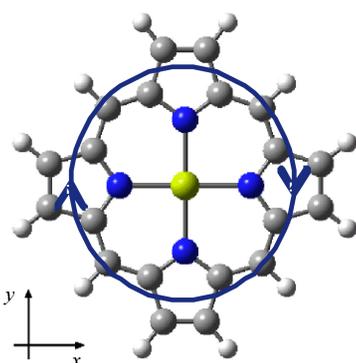


图 2 镁卟啉分子及其分子中被激光激发定态产生的正向电子环流
(相应论文参见: I. Barth, J. Manz, *Phys. Rev. A* 75, (2007) 012510-1-9 和其中的参考文献)

用。这个研究方向方兴未艾。

二、氢原子量子力学哈密顿量的正确形式与狄拉克正则量子化的推广

一对经典力学量 A, B 有泊松括号 $\{A, B\}$ ，按照狄拉克的正则量子化方案，相应量子力学力学量 A 和 B 的对易子 $[A, B]$ 必须满足对应关系 $[A, B] = i\hbar \{A, B\}$ 。但是，对于氢原子，量子力学结果是：

$$[p_\theta, H] = i\hbar \frac{\cot \theta}{\mu(\sin \theta)^2} \left(p_\phi^2 - \frac{\hbar^2}{4} \right),$$

而泊松括号为：

$$\{p_\theta, H\} = \frac{\cot \theta}{\mu(\sin \theta)^2} p_\phi^2.$$

正则量子化方案以自洽的方式无法解释为什么量子力学中会多出一项。狄拉克的说法是：在实用时，正则量子化仅对直角坐标系成立，然后通过坐标变换变换到需要的坐标系去。这就是说，量子力学中存在本质上的优越坐标系。这是一个理论物理困境！一方面，物理学规

律不应该依赖坐标，另一方面，又不知道为什么曲线坐标系下正则量子化规则不对。

爱因斯坦对基本理论的要求是：“是理论决定了什么才能被测量。”所以，从爱因斯坦的观点看来，正则量子化方案有其缺陷。很多人注意过这个困境，例如希夫 (Schiff)，格雷纳 (Greiner)，王竹溪等，但是研究的进展不大。

研究进展一直不大的主要原因是这个困境存在却并不严重，完全可以依靠引进一些规则来消除它。直到近几年低维体系的研究提出很多新物理问题，我们首先意识到一些问题和这个长期被忽视的正则量子化困境相关。例如一个电子限制在圆环或者曲面上运动，通常的量子化规则给出的动能算符是：

$$T = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2$$

但是实验支持的结果是（以曲面为例， M 为平均曲率， K 为曲面的高斯曲率）：

$$T = -\frac{\hbar^2}{2\mu} (\nabla^2 + (M^2 - K)).$$

理论和实验不符合的困难不容回避！为了行文方便，这里并没有完全按物理学的历史来叙述这个问题，有兴趣者请参阅论文：Q. H. Liu, L. H. Tang, and D. M. Xun, *Phys. Rev. A* 84, (2011) 042101.

从理论上看这个问题也很不平凡。原来的量子力学是基于内禀几何学，不容许引入外曲率（平均曲率就是二维曲面上的外曲率）。外曲率牵涉到要把曲面嵌入到高维平直空间中去。

让我们检查一下狄拉克的正

则量子化规则，看看是否有发展的余地。狄拉克将动量和位置 (q_i, p_j) 间共 3 组对易关系称为基本对易关系，也只有这样一个基本假设。对动量和位置和体系的哈密顿函数间的对易关系 $[q_i, H]$ 和 $[p_j, H]$ 也没有作任何要求。这一点不难理解，量子力学中的哈密顿算符不是必须从经典力学过渡而来。不妨提出如下问题：如果一个量子力学体系是从经典力学通过量子化而得到，例如氢原子、谐振子，甚至一些理论模型，什么情况下量子力学的对易关系 $[q_i, H]$ 和 $[p_j, H]$ 和经典力学的泊松括号 $\{q_i, H\}$ 和 $\{p_j, H\}$ 间具有完善的对易关系？总不至于矛盾吧？于是，我们在 2011 年提出了所谓强化量子化方法。在这个方法中，将动量和位置 $[q_i, p_j]$ 的对易关系称为第一类基本对易关系，而把对易关系 $[q_i, H]$ 和 $[p_j, H]$ 称为第二类，同时量子化结果令人振奋：不但只有直角坐标是正确的，而且只有把弯曲的空间嵌入到平直时空中才能给出正确的结果。

强化量子化方法不但给氢原子体系哈密顿算符为什么只能在直角坐标下量子化一个说法，还给厄伦费斯特 (Ehrenfest) 定理成立的



(上接 39 页) (高阻尼系统，背景气体所导致的颗粒随机布朗运动与颗粒间相互作用相结合) 各种动力学尺度上的运动过程。复杂等离子体系统也是一个桥梁，可以将传统物质中的离散的单个颗粒运动与连续的介质运动链接起来。在微重力环境下，所形成的系统将更加各

坐标系等等问题提供了说法。进一步，对于弯曲空间中的量子运动，需要高维的平直空间才能正确处理量子化问题。

本研究意味着量子力学中平直时空可能具有优越性。由于只有平直时空存在全局直角坐标系，所以基本的量子化只能在直角坐标系中进行。由于量子力学和广义相对论难以统一到同一个理论框架内，本研究方向涉及内容广泛，深及基础，广达实验，大有可为。

三、结语和讨论

长期以来，我们对氢原子定态的认识止于实空间的电子云，较少涉及定态电子流。而流密度其实更为深刻也更为物理。注意在位形空间中，概率密度算符和概率流密度算符并不对易。那么，从实空间中的对概率密度的认识扩展到对流密度的认识，具有互补的意义，认识也将更加全面。

在几何中，任何弯曲的时空一定可以嵌入到高维的平直时空中去。由于平直时空可以建立理论确立无疑的形式，基于内禀几何的理论就是有效理论。在对各种有效理

向同性，从而更加接近自然界中的传统物质的性质。可以说，复杂等离子体系统将各个不同的经典物理学科 (包括等离子体物理、流体力学、凝聚态物理、电磁学、宇宙物理等) 有机的结合在了一起，尤其是对于传统物质的基础研究更有着不可估量的意义。

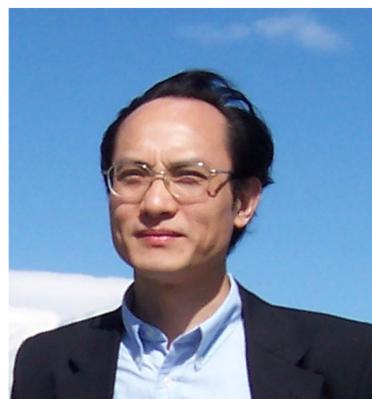
论进行比较的时候发现的种种问题，可能和没有找到比较的基准相关。

本文讨论的问题，很明显是很活跃的前沿研究课题。但是这两个研究方向，和开创人在本科量子力学学习时培养出的学术兴奋点有很大关系。所以，大学教育应当加强学生学术兴奋点的诱导、培养和强化方面的训练。

(湖南大学理论物理研究所 410082)

作者简介

刘全慧，1963 年生，物理学教授、博导。湖南大学理论物理研究所所长。发现并培养了一批理科人才。代表性研究成果：在凝聚态物理中研究几何嵌入效应，发现并命名了量子力学几何动量。



致谢：作者感谢墨菲尔教授 (G.Morfill)，托马斯博士 (H.Thomas)，托马博士 (M.Thoma)，赫拉巴克博士 (S.Khrapak)，莫洛特科夫博士 (V.Molotkov) 对本文提供插图和宝贵建议。

(德国马普学会地外物理研究所)