基于双区间斯图姆-刘维尔理论的急剧弯曲导线上的量子力学

Jo˜ao Paulo M. Pitelli,[1,*] Ricardo A. Mosna,[1,†] 和 Felipe Felix Souto[1,‡]

[1] *Departamento de Matemática Aplicada, Universidade Estadual de Campinas, 13083-859, Campinas, São Paulo, Brazil*

我们通过双区间斯图姆-刘维尔理论给出的边界条件所涉及的三个参数，近似描述弯曲区域附近的物理过程，从而研究弯曲导线上的量子力学。由于高曲率导线上的几何势很强且不可积，这些参数取决于弯曲导线的正则化方式。因此，除非我们确切知道导线的形状，否则本文提出的方法不仅是一种有用的近似，也是处理高曲率导线上量子力学问题所必需的方案。

arXiv:2303.00483v1 [quant-ph] 1 Mar 2023

I. 引言

与经典力学中的情况不同，如果不谨慎地明确规定定义系统的约束，对受约束系统进行量子化可能会导致歧义。在经典力学中，限制在欧几里得空间的曲线或曲面M上的粒子的运动，至少可以用两种不同但等价的方式描述。粒子既可以通过 M 横向不断增强的约束力[1] 加以限制，也可以直接采用广义坐标，从而避免明确规定约束力的麻烦。在量子力学中，这两种方法会导出不同的结果 [2], ; 第一种方法总会引入一个几何势 V_g ，该势取决于 M上的外曲率。直接而朴素地采用第二种方法，则会完全遗漏这一额外势。

正如 da Costa 在 [3, 4], 所示，对于具有主曲率 k_1 和 k_2的光滑曲面 S ，几何势为

$$V_g = -\frac{\hbar^2}{2m}(K - H^2), \tag{1}$$

其中， $K = k_1 k_2$ 和 $H = (k_1 + k_2)/2$ 分别是 S的高斯曲率和平均曲率。[2] 消去波函数的横向模式并取约束力趋于无穷大的极限后，得到的有效薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{LB}\psi + V_g(q_1, q_2)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \tag{2}$$

其中 q_1、 q_2 是 S上的坐标，而 Δ_{LB} 是相应的协变拉普拉斯算子（拉普拉斯-贝尔特拉米算子）。粒子被限制在一根导线上时，由 $\mathbb{R}^2$中的一条曲线 C 表示，情况完全类似。此时，不再涉及 k_1 和 k_2，而只有一个相关的曲率 $k = 1/R$，其中 R 是 C上一点处的密切圆半径。此外，若以弧长 s作为参数来表示 C ，协变拉普拉斯算子就化为 d^2/ds^2，定态薛定谔方程变为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{ds^2} + V_g(s)\psi = E\psi,$$

with

$$V_g = -\frac{\hbar^2}{8m}k(s)^2 = -\frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{R^2(s)}. \tag{3}$$

当约束足够光滑时，这种表述效果很好。然而，对于拐角（曲线或曲面上的余维 1 集合）或尖端（曲面上的余维 2 集合），曲率并无明确定义，且在前一种情况下会产生严重困难。以曲线为例，可以说明这一点。考虑图1所示弯曲导线的一种正则化版本。描述锐角弯曲波导几何形状的唯一参数是其张角$2\eta = \pi - \Delta\theta$。由于曲线的曲率 k 表示该曲线切向量的转角变化率，因此有

$$\int k(s)ds = \Delta\theta, \tag{4}$$

其中，我们对导线曲率集中的（小）区域进行积分。因此，在尖锐拐角的极限下，应有 $k(s) = \Delta\theta\,\delta(s)$。另一方面，从式（3）可见，几何势正比于 $1/R^2(s)$，因此，在曲线突然弯折的极限下，它表现为一个平方 δ 势；而这种势本身当然是没有明确定义的。这反映出，在尖锐拐角的极限下，几何势将高度依赖于弯曲区域的正则化方式。不同的正则化方式可能导致截然不同的结果。

不过，我们的直觉或许会告诉我们，对于具有物理意义的急剧弯曲量子导线情形，应该有可能提取一些信息。当 $kR \ll 1$ 时，情况确实如此；其中 $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ 是量子粒子的能量， R 是曲率显著的长度尺度。我们将证明，急剧弯曲导线上的量子散射可以

* pitelli@unicamp.br

† mosna@unicamp.br

‡ felipe_felix_souto@hotmail.com[1] 不过，这里存在一些技术细节；其中之一是，如果约束势在整个子流形上并非恒定，就会产生切向加速度 [1]）。[2] 我们应当强调，由方程（1）给出的 V_g 并非普适结果。它在很大程度上取决于约束粒子的势在整个曲面上均匀且沿横向作用这一事实。

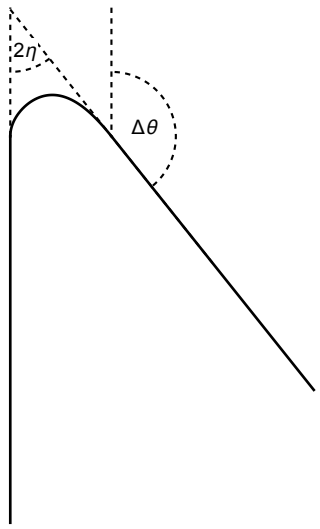

图1： 一个正则化拐角（实线曲线）。

通过图 2 所示的拐角理想化模型，并配以适当的边界条件来描述。由于量子力学要求幺正性（概率守恒），我们只考虑自伴边界条件。这些边界条件可通过多区间斯图姆–刘维尔理论 [5, 6]，得到；该理论将拐角两侧的波函数值（及其导数）联系起来。

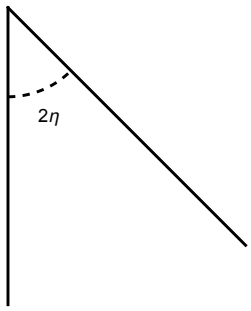

图 2： 理想化弯曲导线。

在文献 [7, 8],中，已经探讨了使用自伴边界条件来近似高曲率区域附近低维量子力学的问题，其中考虑了圆锥顶点附近的量子力学。与急剧弯曲导线的情形相反，根据 da Costa形式主义可以证明，此处的几何势是一个分布，其表达式为

$$V_{\rm geo} = -\frac{\hbar^2}{8m}\frac{1-\alpha^2}{\alpha^2\rho^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1-\alpha}{\alpha}\frac{\delta(\rho)}{\rho}, \qquad (5)$$

其中 ρ为径向坐标，而 $\delta = 2\pi(1-\alpha)$ 是角亏。受 Kay 和 Studer 的开创性论文启发 [9], ，δ势被视为形如 $U_{\rm short} \equiv \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1-\alpha}{\alpha}\frac{\delta_{(\rho-a)}}{a}$ 且满足$a \ll 1$的短程势。随后，借助自伴扩张理论，在不含该短程势的情况下求解了静态（$E = 0$）薛定谔方程。最后，通过要求 β ，将任意的自伴扩张参数与真实问题联系起来。

$$\left.\frac{\rho}{\Psi^{\beta}_{\rm static}}\frac{d\Psi^{\beta}_{\rm static}}{d\rho}\right|_{\rho=a} = \left.\frac{\rho}{\Psi^{\rm true}_{\rm static}}\frac{d\Psi^{\rm true}_{\rm static}}{d\rho}\right|_{\rho=a}, \qquad (6)$$

并注意到，上述方程右侧可通过在 $a \to 0$的极限下对定态薛定谔方程积分得到。这一过程给出了唯一的自伴扩张参数 β 与由参数 δ表示的问题物理性质之间的唯一关系。之所以能够做到这一点，是因为短程势可以积分。这与以下事实有关：分布势的物理参数不依赖于短长度尺度下采用的具体正则化方式（见 [10]）。

本文中，我们考察将导线弯成尖锐拐角后产生的强得多的（非分布型）几何势。在这种情况下，不能贸然使用 Kay 和 Studer [9] 的方法。事实上，由于我们的势具有 $\sim \delta^2(s)$ 的形式，我们将找到一组三个参数，用以刻画导线的每一种特定正则化。这组参数（相对于圆锥上的单个自伴参数而言）源于这样一个事实：“奇异”子流形（在我们的例子中是拐角）的余维为 1，因而将导线分成两个独立区域（这也是我们采用双区间斯图姆-刘维尔理论的原因）。

总之，我们的主要目标是借助自伴扩张理论，用理想化拐角对急剧弯曲的导线进行建模。我们认为，即便不了解拐角正则化的全部细节，也可以假定我们处理的是一个由三个实验参数刻画的理想化拐角。接着，我们将确定这些参数如何取决于张角和长度尺度 R。我们将看到，只要能量尺度k 满足 $kR \ll 1$，就可以利用这些参数预测其他物理可观测量，例如束缚态。最后，我们得出结论：即使研究微米级（甚至纳米级）导线，在无法控制导线具体弯曲方式的情况下，仍然能够作出物理预测。

本文结构如下：第二节简要研究双区间 Sturm-Liouville 问题的数学方面。在第三节 A 部分，我们将第二节介绍的形式主义应用于理想化拐角的情形，并考察透射振幅和反射振幅如何取决于边界条件的选择。在第三节 B 部分，我们研究弯曲导线情形下的 da Costa形式主义 [3, 4] 。我们首先指出，对于 $kR \ll 1$，总是可以利用双区间斯图姆-刘维尔理论，将弯曲导线建模为理想化拐角。然后

我们通过两个可解析求解的具体例子来阐释这一主张，即开放书模型和指数平滑势。最后，我们将在第四节进行总结。

II. 双区间 Sturm-Liouville 问题

令 $-\infty \le a_i < b_i \le \infty$ 和 $J_i = (a_i, b_i)$，$i = 1,2$，且 $b_1 \le a_2$。考虑 Sturm-Liouville 问题

$$-(p_i y_i')' + q_i y_i = \lambda w_i y_i, \quad i = 1, 2, \tag{7}$$

其中 $w_i > 0$ 是每个区间上的权函数。相应的希尔伯特空间为 $H = H_1 + H_2$，其中$H_i = L^2(J_i, w_i)$，$i = 1,2$，且 H 中$f = \{f_1, f_2\}$ 与 $g = \{g_1, g_2\}$ 之间的内积定义为

$$(f, g)_H = (f_1, g_1)_{H_1} + (f_2, g_2)_{H_2} \tag{8}$$

其中 $f_i \in H_i$，$i = 1,2$。对于多区间 Sturm-Liouville 问题，在考虑概率振幅（以及态的范数）和定义在 H中的算符对称性时，这是正确的内积。

如果方程（7）的两个解在任意点 $c \in J_i \cup \{a_i, b_i\}$ 附近均平方可积，我们就称该点处于极限圆型。否则，我们称 c 处于极限点型；此时无需施加边界条件，只要平方可积就足以确定该点附近的解。

对于如图 2 所示的两条相连的半无限直导线，我们有 $a_1 = -\infty$、$b_1 = 0^-$、$a_2 = 0^+$ 和 $b_2 = \infty$。Sturm-Liouville 方程 (7) 中的参数为 $\lambda = \frac{2mE}{\hbar^2}$、$p_i = 1$、$q_i = 0$ 和 $w_i = 1$、$i = 1, 2$。因此，导线上每个区间的定态薛定谔方程为

$$-\frac{d^2\Psi(s)}{ds^2} = \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(s), \quad s \in (-\infty, 0^-) \cup (0^+, \infty). \tag{9}$$

$a_1 = -\infty$ 和 $b_2 = \infty$ 处于极限点型。为处理 $a_2 = b_1 = 0$，我们首先注意到它们是方程 (9) 的正则点。因此，它们属于极限圆型。根据参考文献 [5]，中的双区间斯图姆-刘维尔理论，这些点处满足幺正性的边界条件为

$$AY[a_2] + BY[b_1] = 0, \tag{10}$$

with

$$Y[b_1] = \begin{bmatrix} y_1(0^-) \\ y_1'(0^-) \end{bmatrix} \text{ and } Y[a_2] = \begin{bmatrix} y_2(0^+) \\ y_2'(0^+) \end{bmatrix}, \tag{11}$$

且 A 且 B 为满足条件的 2×2 复矩阵

i) $\mathrm{rank}(A, B) = 2$,

ii) $AEA^* - BEB^* = 0$,

其中 $E = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$。可以证明 [5]，方程 (10) 也可以用 A 和 B 表示，且满足条件 i) 和 ii)，其标准形式为

$$Y[a_2] = e^{i\gamma} K Y[b_1], \ -\pi < \gamma \le \pi, \ K \in SL_2(\mathbb{R}), \tag{12}$$

其中 $SL_2(\mathbb{R})$ 是行列式为一的 2×2实矩阵群。

III. 弯曲导线上的量子力学

A. 理想化拐角

我们来考虑一根长度参数为 $s \in (-\infty, \infty)$、在 $s = 0$ 处急剧弯折的无限长导线上的量子散射。区间 $J_1 = (-\infty, 0)$ 和 $J_2 = (0, \infty)$ 上的定态薛定谔方程为

$$\begin{array}{l} -\frac{d^2}{ds^2}\psi_1(s) = k^2\psi_1(s), \ -\infty < s < 0, \\ -\frac{d^2}{ds^2}\psi_2(s) = k^2\psi_2(s), \quad 0 < s < \infty, \end{array} \tag{13}$$

其中 $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$。

我们来考虑一个满足以下条件的散射问题

$$\begin{array}{ll} \psi_1(s) = e^{iks} + re^{-iks}, & -\infty < s < 0, \\ \psi_2(s) = te^{iks}, & 0 < s < \infty, \end{array} \tag{14}$$

其中 t 和 r 分别为透射振幅和反射振幅。由式 (12) 可得

$$\begin{bmatrix} \psi_1(0^-) \\ \psi_1'(0^-) \end{bmatrix} = e^{i\gamma} K \begin{bmatrix} \psi_2(0^+) \\ \psi_2'(0^+) \end{bmatrix}, \tag{15}$$

其中 $-\pi < \gamma < \pi$ 和

$$K = \begin{pmatrix} a & b \\ c & \frac{1+bc}{a} \end{pmatrix} \in SL_2(\mathbb{R}), \tag{16}$$

为简便起见，我们假设 $a \neq 0$。直接计算可得，满足式 (15) 中边界条件的反射系数和透射系数为

$$\begin{array}{l} r = -\frac{iac + (a^2 - bc - 1)k + iabk^2}{iac + (a^2 + bc + 1)k - iabk^2}, \\ t = \frac{2ae^{i\gamma}k}{iac + (a^2 + bc + 1)k - iabk^2}. \end{array} \tag{17}$$

so that $|r|^2 + |t|^2 = 1$.

A 例如，考虑$\gamma = 0$ 和 $K = \mathrm{diag}(1, 1)$。这一选择等价于波函数及其导数在 $\sigma = 0$ 处连续，即

$$\psi_1(0^-) = \psi_2(0^+) \text{ and } \psi_1'(0^-) = \psi_2'(0^+). \tag{18}$$

由式（17）可知，$|r|^2 = 0$ 和 $|t|^2 = 1$，因此在这种情况下没有反射波。

作为另一个例子，以 $\gamma = 0$和 $K = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$为例。于是我们有

$$|r|^2 = 1 - \frac{4k^2}{k^4 + 7k^2 + 1}, \text{ and } |t|^2 = \frac{4k^2}{k^4 + 7k^2 + 1}. \quad (19)$$

我们在图3中绘出了前述第二个例子的透射振幅和反射振幅随 k 的变化。

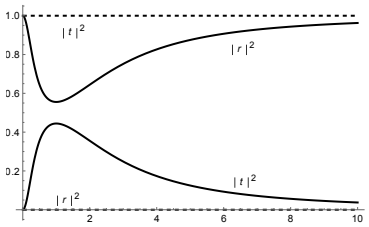

图3: 反射振幅和透射振幅边界条件由 $\gamma = 0$ 和 $K = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$给出（虚线）以及 $\gamma = 0$ 和 $K = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$（实线）。

B. 具有几何势的弯曲导线

1. *Arbitrary shape*

假设粒子被限制在一根导线上，该导线除长度为 R 的小区域外均为直线。我们还假设，在小于 R的长度尺度上，这个拐角没有任何内部结构。由式（3）可知 $k \sim 1/R$，因此 $V_g \sim 1/R^2$。

将 C 参数化为 $s \mapsto \vec{r}(s) = (x(s)\ y(s))$，其中 s为曲线的弧长，可得

$$V_g(s) = -\frac{\hbar^2}{8m}k^2(s) = -\frac{\hbar^2}{8m}\left\|\frac{d^2\vec{r}}{ds^2}\right\|^2,$$

这里我们利用了 $\|d\vec{r}(s)/ds\| = 1$这一事实。将所有长度都用 R作为单位表示，可以清楚地体现出 V_g 的标度性质。写作 $\sigma = s/R$，我们有

$$V_g = -\frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{R^4}\left\|\frac{d^2\vec{r}}{d\sigma^2}\right\|^2 \equiv -\frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{R^2}U(\sigma),$$

其中 $U(\sigma) \equiv \frac{\left\|\frac{d^2\vec{r}}{d\sigma^2}\right\|^2}{R^2} \leq 1$，因为 R是我们的基本空间尺度。用无量纲坐标 σ表示，薛定谔方程变为

$$-\frac{d^2\phi}{d\sigma^2} + U(\sigma)\phi = R^2k^2\phi, \quad \phi(\sigma) = R^{1/2}\psi(R\sigma) \quad (20)$$

（前因子确保 ϕ 与 ψ具有相同的归一化方式；特别地，如果 $\int|\psi(s)|^2ds = 1$，则 $\int|\phi(\sigma)|^2d\sigma = 1$。）

考虑方程 (20) 的两个解 $\phi_1(\sigma)$ 和 $\phi_2(\sigma)$，其能量分别为 k_1 和 k_2。由于二者 ϕ_1 和 ϕ_2 满足相同势能下的薛定谔方程，因此我们得到

$$\phi_1^{*''}\phi_2 - \phi_2''\phi_1^* = \left(k_2^2R^2 - k_1^2R^2\right)\phi_1^*\phi_2.$$

左侧可改写为 $\frac{d}{d\sigma}\left(\phi_1^{*'}\phi_2 - \phi_2'\phi_1^*\right)$，积分后得到：

$$\begin{aligned}&\left[\phi_1^{*'}(\sigma)\phi_2(\sigma) - \phi_2'(\sigma)\phi_1^*(\sigma)\right]_{-1/2}^{+1/2} = \\ &R^2\left(k_2^2 - k_1^2\right)\int_{-1/2}^{+1/2}\phi_1^*(\sigma)\phi_2(\sigma)d\sigma \\ &\leq R^2\left(k_2^2 - k_1^2\right),\end{aligned} \quad (21)$$

其中，在最后一行我们使用了柯西-施瓦茨不等式。对于满足 $k_iR_i \ll 1$、$i = 1,\ 2$ 的 k_i，我们有

$$\left[\phi_1^{*'}(\sigma)\phi_2(\sigma) - \phi_2'(\sigma)\phi_1^*(\sigma)\right]_{-1/2}^{+1/2} \approx 0. \quad (22)$$

当以下条件成立时，该方程成立

$$\begin{aligned}\phi_i(+1/2) &= a\phi_i(-1/2) + b\phi_i'(-1/2), \\ \phi_i'(+1/2) &= c\phi_i(-1/2) + d\phi_i'(-1/2)\end{aligned}, \quad i = 1, 2, \quad (23)$$

只要

$$ad - bc = 1. \quad (24)$$

注意，$\sigma = \pm\frac{1}{2}$意味着 $s = \pm\frac{1}{2}R$。此外，ψ_i是无量纲参数 ks的函数。在$kR \ll 1$ 的极限下，我们得到

$$\begin{aligned}\psi_i(0^+) &= a\psi_i(0^-) + b\psi_i'(0^-), \\ \psi_i'(0^+) &= c\psi_i(0^-) + d\psi_i'(0^-)\end{aligned}, \quad i = 1, 2, \quad (25)$$

这就是在 $\gamma = 0$ 条件下，方程（12）给出的条件。因此我们得出结论，在这种情况下，无论弯曲区域上的势的具体形式如何，只要满足 $kR \ll 1$，就可以将导线建模为理想拐角。

让我们用两个可精确求解的势来说明上述最后一个论断。

2. *Open book Shape*

考虑图4所示的正则化。导线的非直线部分被限制在长度为 $2R\eta$的（小）圆形区域内。由公式（3）可得

$$\frac{\hbar^2}{2m}V_g(s) = \begin{cases}0, & \text{if } |s| > R\eta \\ -\frac{1}{4}\frac{1}{R^2}, & \text{if } |s| < R\eta,\end{cases}$$

定态薛定谔方程变为

$$\begin{aligned}&-\tfrac{d^2}{ds^2}\phi_1(s) = k^2\phi_1(s), && -\infty < s < -R\eta, \\ &-\tfrac{d^2}{ds^2}\phi_2(s) - \tfrac{1}{4R^2}\phi_2(s) = k^2\phi_2(s), && -R\eta < s < R\eta, \\ &-\tfrac{d^2}{d\sigma^2}\phi_3(s) = k^2\phi_3(s), && R\eta < s < \infty.\end{aligned} \quad (26)$$

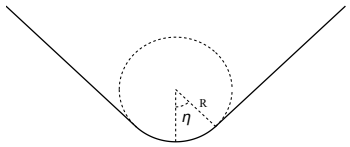

图4： 开书形结构模型的示意图。

考虑这样一个散射问题：

$$\begin{aligned}
&\phi_1(s) = e^{iks} + re^{-iks}, && -\infty < s < R\eta,\\
&\phi_2(s) = \alpha e^{is\frac{\sqrt{1+4R^2k^2}}{2R}} + \beta e^{-is\frac{\sqrt{1+4R^2k^2}}{2R}}, && -R\eta < s < R\eta,\\
&\phi_3(s) = te^{iks}, && R\eta < s < \infty.
\end{aligned} \tag{27}$$

要求波函数及其导数在 $s = \pm R\eta$ 处连续，可得

$$\begin{aligned}
r &= \frac{e^{-2i\eta kR}\left(-1+e^{2i\eta\sqrt{4k^2R^2+1}}\right)}{-8k^2R^2e^{2i\eta\sqrt{4k^2R^2+1}}+4kR\sqrt{4k^2R^2+1}e^{2i\eta\sqrt{4k^2R^2+1}}-e^{2i\eta\sqrt{4k^2R^2+1}}+8k^2R^2+4kR\sqrt{4k^2R^2+1}+1},\\
t &= \frac{8kR\sqrt{4k^2R^2+1}e^{i\eta\sqrt{4k^2R^2+1}-2i\eta kR}}{-8k^2R^2e^{2i\eta\sqrt{4k^2R^2+1}}+4kR\sqrt{4k^2R^2+1}e^{2i\eta\sqrt{4k^2R^2+1}}-e^{2i\eta\sqrt{4k^2R^2+1}}+8k^2R^2+4kR\sqrt{4k^2R^2+1}+1}.
\end{aligned} \tag{28}$$

注意，这些系数取决于弯曲导线的具体正则化方式（此处为一个开书模型，其参数为 R 和 η）。不过，让我们考虑低能散射 $Rk \ll 1$，并将 t 和 r 展开至 $\mathcal{O}$ 阶（k^2R^2）。我们有

$$\begin{aligned}
r &= -1 + 2ikR\left(\eta + 2\cot\eta\right) + 2k^2R^2\left[\eta^2 + 4\eta\cot\eta + 2ikR(\eta + 2\cot\eta) + 8\csc^2\eta - 4\right],\\
t &= 4ikR\csc\eta + 8k^2R^2\left(\eta + 2\cot\eta\right))\csc\eta.
\end{aligned} \tag{29}$$

将式 (17) 展开至 k 的二阶，并与式 (29) 逐项比较，可得

$$\begin{aligned}
a &= \tfrac{1}{2}\eta\sin\eta + \cos\eta,\\
b &= -\tfrac{1}{2}R\sin\eta\left(\eta^2 + 4\eta\cot\eta - 4\right),\\
c &= -\tfrac{\sin\eta}{2R}.
\end{aligned} \tag{30}$$

在图5中，我们绘出了开放书模型和边界条件参数满足式（30）的理想化弯曲导线的透射系数 $|t|^2$ 随 kR 变化的曲线。可以看出，对于 $kR \lesssim 1$，我们的建模效果良好。

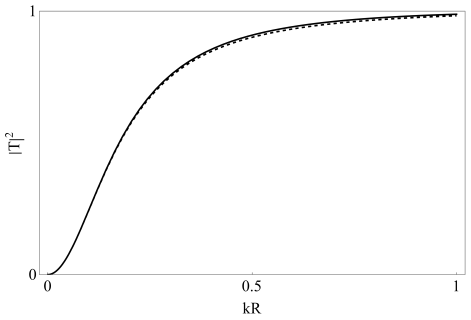

图5： 透射系数随 kR 变化的关系：对于打开书形导线（虚线）以及参数 a、b 和 c 由式 (30) 给出的理想化弯曲导线（实线）。我们取 $\eta = \pi/4$。

另一个关键参数是角度 η。在图6中，我们展示了在固定 kR 时，我们的建模如何依赖于 η。总之，图 5 和图 6 表明，对于具有

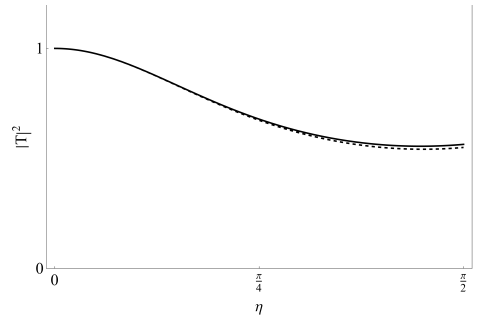

图6： 对于打开书形导线（实线）和满足式（30）的理想化弯曲导线（虚线），透射振幅随 η 的变化。我们取 a、b 和 c。我们选择了 $kR = 1/4$。

当能量（相对于 $1/R^2$）足够低且偏转角 η 较小时，我们的理想化模型效果良好。

已知通过散射实验得到的式（30）中的系数，我们不禁想知道，能否利用这些信息预测其他物理可观测量。举例来说，我们来看看开书形结构的束缚态

模型。它由满足下式的值 κ 给出

$$\begin{aligned}\phi_1(s) &= e^{\kappa s}, && -\infty < s < R\eta,\\ \phi_2(s) &= \alpha e^{s\frac{\sqrt{-1+4R^2\kappa^2}}{2R}} + \beta e^{-s\frac{\sqrt{-1+4R^2\kappa^2}}{2R}}, && -R\eta < s < R\eta,\\ \phi_3(s) &= e^{-\kappa s}, && R\eta < s < \infty.\end{aligned} \tag{31}$$

其中 α 和 β 由 ϕ 和 ϕ 在$s = \pm R\eta$处的连续性确定。直接计算可得

$$\begin{aligned}\frac{1}{\kappa R\sqrt{4\kappa^2R^2-1}}\Big[&e^{-\left(\eta\left(\sqrt{4R^2\kappa^2-1}+\kappa R\right)\right)}\left(\left(2\kappa R\left(\sqrt{4\kappa^2R^2-1}-2\kappa R\right)+1\right)e^{\eta\kappa R}\right.\\ &\left.+\left(4\kappa R\left(\sqrt{4\kappa^2R^2-1}+2\kappa R\right)-1\right)e^{\eta\left(2\sqrt{4\kappa^2R^2-1}+\kappa R\right)}+2\kappa R\left(\sqrt{4\kappa^2R^2-1}-2\kappa R\right)\right]=0.\end{aligned} \tag{32}$$

我们使用软件 Mathematica [12]对上述方程进行了数值求解。我们在图 7 中绘出了 κR 随角度 η 变化的曲线。此外，我们还绘出了理想化模型的束缚态的 κR ，其系数由公式（30）给出。简单计算可得

$$\begin{aligned}\kappa R &= -\frac{-\sqrt{\left(-\frac{bc}{a}-a-\frac{1}{a}\right)^2-4bc}+\frac{bc}{a}+a+\frac{1}{a}}{2b}\\ &= \frac{1}{\eta+2\cot(\eta/2)}\end{aligned} \tag{33}$$

我们看到，对于较小的张角 η （或者等价地，

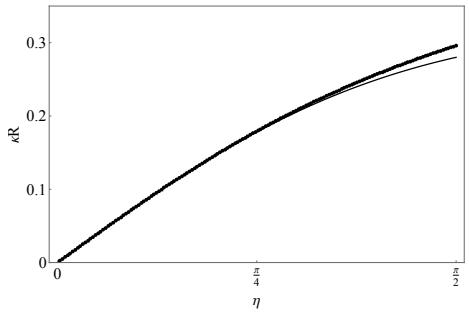

图 7： 开书形结构的束缚态（实线）和理想化模型的束缚态（虚线）。我们再次注意到，当 $\kappa R \ll 1$ （小角度）时，我们的模型效果良好。

$\kappa R \ll 1$)我们的模型能够以极高的精度预测束缚态。

C. 指数平滑势

我们也可以采用另一种可精确求解的平滑势。形式为 U ($-\lambda e^{-|s|/\Lambda}$ s) 的势，其中 是用于模拟 V 形导线的正则化曲线的弧长，可满足这一用途 [11]。为了模拟楔形，系数 λ 必须具有 $\lambda = \eta^2/(16\Lambda^2)$ 的形式，其中 η 是该角的

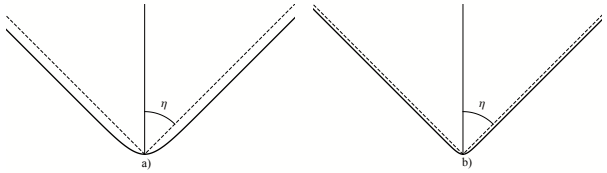

图 8： 正则化导线的形状，其中 a）为$\Lambda = 0.3$ ，b）为 $\Lambda = 0.1$。在这两种情况下， $\eta = \pi/4$。

楔形，且 Λ是正则化参数，如图 8 所示。

从来自$s \to -\infty$ 的入射平面波开始，我们得到散射解

$$\psi_{s<0} = \frac{J_{2i\Lambda k}\left(\frac{1}{2}e^{\frac{s}{2\Lambda}}\eta\right)}{\eta^{2i\Lambda k}} + r\frac{J_{-2i\Lambda k}\left(\frac{1}{2}e^{\frac{s}{2\Lambda}}\eta\right)}{\eta^{-2i\Lambda k}}, \tag{34}$$

当 $s<0$ 时，以及

$$\psi_{s>0} = t\,\eta^{2i\Lambda k}J_{-2i\Lambda k}\left(\frac{1}{2}e^{\frac{s}{2\Lambda}}\eta\right), \tag{35}$$

当 $s>0$ 时。在上述方程中， t 和 r 分别是透射振幅和反射振幅。

通过匹配波函数及其导数通常的连续性条件，我们得到

$$r = \frac{2^{-1+8ik\Lambda}\eta^{-4ik\Lambda}\Gamma(2ik\Lambda+1)\left(\frac{J_{2ik\Lambda+1}\left(\frac{\eta}{2}\right)-J_{2ik\Lambda-1}\left(\frac{\eta}{2}\right)}{J_{-2ik\Lambda-1}\left(\frac{\eta}{2}\right)-J_{1-2ik\Lambda}\left(\frac{\eta}{2}\right)}-\frac{J_{2ik\Lambda}\left(\frac{\eta}{2}\right)}{J_{-2ik\Lambda}\left(\frac{\eta}{2}\right)}\right)}{\Gamma(1-2ik\Lambda)},$$
$$t = -\frac{2^{1+8ik\Lambda}\eta^{-4ik\Lambda}\sinh(2\pi k\Lambda)\Gamma(2ik\Lambda)}{\pi\Gamma(-2ik\Lambda)J_{-2ik\Lambda}\left(\frac{\eta}{2}\right)\left(4k\Lambda J_{-2ik\Lambda}\left(\frac{\eta}{2}\right)-i\eta J_{1-2ik\Lambda}\left(\frac{\eta}{2}\right)\right)}. \tag{36}$$

采用处理该情形时相同的步骤

开放书模型中，我们发现

$$\begin{aligned} a &= \tfrac{1}{4}\eta\left(J_0\left(\tfrac{\eta}{2}\right)\left(4\left(\log\left(\tfrac{\eta}{4}\right)+\gamma\right)J_1\left(\tfrac{\eta}{2}\right)-\pi Y_1\left(\tfrac{\eta}{2}\right)\right)-\pi J_1\left(\tfrac{\eta}{2}\right)Y_0\left(\tfrac{\eta}{2}\right)\right), \\ b &= \tfrac{1}{2}\eta\sigma\left(2\left(\log\left(\tfrac{\eta}{4}\right)+\gamma\right)J_0\left(\tfrac{\eta}{2}\right)-\pi Y_0\left(\tfrac{\eta}{2}\right)\right)\left(\pi Y_1\left(\tfrac{\eta}{2}\right)-2\left(\log\left(\tfrac{\eta}{4}\right)+\gamma\right)J_1\left(\tfrac{\eta}{2}\right)\right), \\ c &= -\tfrac{\eta J_0\left(\frac{\eta}{2}\right)J_1\left(\frac{\eta}{2}\right)}{2\Lambda}. \end{aligned} \tag{37}$$

图9展示了平滑指数情形和理想化模型的透射系数随 kR 的变化，其中系数由公式（37）给出。透射系数（固定 kR时）和束缚

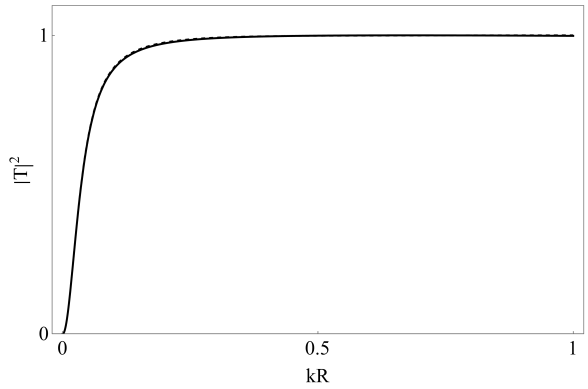

图9： 指数平滑势（实线）和理想化弯曲导线（ a、 b 和 c 由公式（37）给出；虚线）的透射系数随 kR的变化。我们取 $\eta = \pi/4$。

态随角度 η 的变化如图10和图11所示。

IV. 结论

曲率尺度为 $\sim 1/R$ 的弯曲导线上的受限量子力学，可用具有适当边界条件的理想化弯曲导线近似。只要 $kR \ll 1$，这种近似就成立，其中k 为能量尺度。由于在极限 $R \to 0$下，da Costa形式主义产生的几何势具有 $\sim \delta^2(s)$的形式，边界条件参数不仅取决于曲率尺度和张角，还取决于导线弯曲的具体方式（即急弯区域的具体正则化方式）。因此，对于微米（甚至纳米）导线，在曲率的精确形式未知时，我们

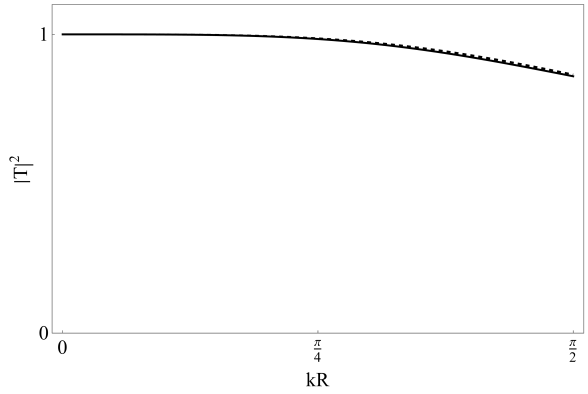

图1 0： 对于指数平滑势（实线）和理想化弯曲导线（虚线），透射振幅随 η 的变化，其中 a、 b 和 c 由式（30）给出。我们取 $kR = 1/4$。

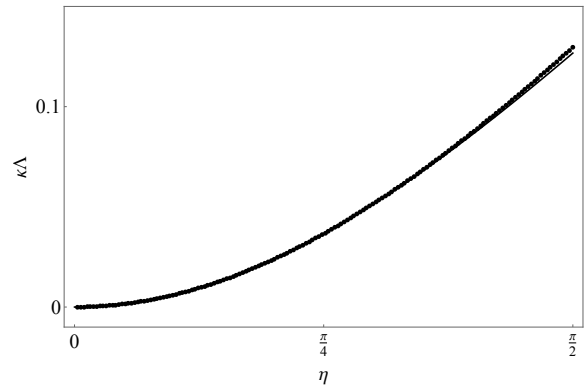

图1 1： 指数平滑势对应的束缚态（实线）与理想化模型对应的束缚态（虚线）。我们再次注意到，对于 $\kappa R \ll 1$ （小角度），我们的模型效果良好。

必须使用上文给出的近似，才能对区域 $kR \ll 1$作出恰当描述。

本文提出的方法为描述余维

1 奇异流形上的量子力学提供了一种新途径。文献 [7, 8], 也运用自伴扩张理论来描述圆锥顶点附近的量子力学。然而，由于几何势可积，且奇异区域是圆锥面上的一个单独点，因此只需一个与边界条件相关的参数，并且该参数与物理参数之间存在唯一对应关系。另一方面，急剧弯曲的导线上的曲率奇异性产生的势不可积，并将导线分割为两个不相交区间。因此，描述弯曲区域需要三个相互独立的边界条件参数。此外，这些参数与物理参数（即角度）之间并不存在唯一对应关系，而是极大程度上取决于正则化方案。对比图 5 和图 9 即可看出这一点。开书形结构和

尽管这两种正则化会导向相同的极限弯曲导线，但指数平滑势由此可见，我们的方法不再只是单纯的近似，而是处理急剧弯曲导线的有效方法。

致谢

J.P.M.P. 的部分研究经费由巴西国家科学技术发展委员会（CNPq，巴西）通过第 311443/2021-4 号拨款提供。R. A. M. 的部分研究经费由巴西国家科学技术发展委员会（CNPq，巴西）通过第 310403/2019-7 号拨款提供。F. F. S. 的研究经费由巴西高等教育人员培养协调机构（CAPES，巴西）通过第 001-1684974 号拨款提供。

[1] N. G. van Kampen 和 J. J. Lodder, *Constraints*, 《美国物理学杂志》**52**, 419（1984）。[2] M. Ikegami、Y. Nagaoka、S. Takagi 和 T. Tanzawa, *Quantum Mechanics of a Particle on a Curved Surface — Comparison of Three Different Approaches —* , 《理论物理进展》88, 229（1992）。[3] R.C.T. da Costa, *Quantum mechanics of a constrained particle* **23**, 1982 1981 , 《物理评论 A》（）。[4] R.C.T. da Costa, *Constrained particles in quantum mechanics* **36**, 393 1983 , 《新水泥通讯》（）。[5] A. Zettl, *Sturm-liouville theory*, 美国数学学会**121**（2012）。[6] X. Cao、Z. Wang 和 H. Wu, *On the boundary conditions in self-adjoint multi-interval Sturm–Liouville problems* , 《线性代数及其应用》, **430**, 2877（2009）。

[7] C. Filgueiras 和 F. Moraes, *On the quantum dynamics of a point particle in conical space* **323**, 3150 , 《物理学年刊》（2008）。[8] F. M. Andrade、A. R. Chumbes、C. Filgueiras 和 E. O. Silva, *Quantum motion of a spinless particle in curved space: A viewpoint of scattering theory*, 《欧洲物理快报》**128**, 10002（2019）。[9] B. Kay 和 U. M. Studer, *Boundary conditions for quantum mechanics on cones and fields around cosmic strings*, 《数学物理通讯》**139**, 103（1991）。[10] S. Gopalakrishnan, *Self-Adjointness and the Renormal-ization of Singular Potentials*, 学士论文，阿默斯特学院，2006 年。[11] C. M. Fabre 和 D. Gu´ery-Odelin, 《美国物理学杂志》**79**, 755（2011）。[12] W. R. Inc., Mathematica, 13.2版，伊利诺伊州尚佩恩，2022 年。