云南大学学报（自然科学版），2011，33（4）：417～421　　CN 53－1045/N　ISSN 0258－7971
Journal of Yunnan University　　http://www.yndxxb.ynu.edu.cn

附加约束奇异 Lagrange 量系统的量子化理论*

李瑞洁[1]，李子平[2]

（1. 华北电力大学 数理系，北京　102206；2. 北京工业大学 应用数理学院，北京　100022）

摘要：研究了含附加约束奇异 Lagrange 量系统（约束奇异系统）的量子化，给出了该约束奇异系统修改的 Dirac－Bergmann 算法，分析了系统的经典正则对称性，研究了它的路径积分量子化和量子对称性质，通过实例说明经典理论中对称性和守恒律的关系在量子理论中不再有效.

关键词：约束 Hamilton 系统，附加约束，量子理论，守恒律

中图分类号：O 316　　文献标识码：A　　文章编号：0258－7971（2011）04－0417－05

动力学系统的描述有位形空间中的 Lagrange 体制和相空间中的 Hamilton 体制 2 种形式，系统的量子化通常是由相空间中的正则变量来实现的. 系统的状态和运动往往受到某些约束条件的限制，约束可分为 2 类：一类是位形空间中的附加条件（如力学中的完整约束和非完整约束，场论中的附加条件），不妨称为外在约束；另一类是相空间描述时，正则变量间存在的固有约束关系，不妨称为内在约束. 众多的物理系统在位形空间描述时，尽管不存在任何附加约束，但过渡到相空间描述时，正则变量间却存在某些约束关系（例如，用所谓奇异 Lagrange 量描述的系统，包括所有规范理论，就属于这类情况），为约束 Hamilton 系统. 由于正则变量间彼此不独立，初等量子力学中的量子化方法，对该系统已不再适用. Dirac 首先给出了约束 Hamilton 系统的算符形式量子化方法[1]，半个世纪以来，已建立了多种算符形式和路径积分形式量子化以及量子对称性质[2]. 然而，在质点力学的经典理论过渡到量子理论中，已研究的系统其正则变量是独立的（正规 Lagrange 量系统），未讨论含附加约束的情况. 场论中仅讨论了不含场量微商附加约束的个别情况下系统的量子化（如非线性 σ－模型，CP^1 模型等[3-4]）. 事实上，场论中的附加约束也有比较复杂的情况，例如研究电磁场在介质分界面附近的性质时，将场强的边界条件视为附加约束，用电磁场的矢量 A_μ 表出，该条件中含 A_μ 和 $\partial_\nu A_\mu$[5]（强子的口袋模型中，口袋表面上非 Abel 规范场论的边界条件也出现类似情况）. 这里我们来研究同时含外在非完整约束和内在约束系统的量子化. 首先给出求该系统在相空间约束修改的 Dirac－Bergmann 算法，其次研究了约束奇异系统的经典正则对称性，通过路径积分形式对该系统作量子化并讨论其量子对称性质. 最后用具体模型的量子化结果，导出的量子水平守恒能量，它不同于经典守恒能量，表明经典的对称性和守恒量的关系，在量子理论中不一定再保持.

1　约束奇异系统的量子化

为简单起见，这里研究有限自由度系统，推广到场论情形是直接的. 考虑用奇异 Lagrange 量 $L(q^i,\dot{q}^i)$（$i=1,2,\cdots,n$）描述的系统，正则动量和正则 Hamilton 量分别为 $p_i=\dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}$ 和 $H_C=p_i\dot{q}^i-L$（重复指标代表求和）. 由 Lagrange 量的奇异性，从正则动量的定义式，必导致相空间中正则变量 $q^i(t)$，$p_i(t)$ 之间存在内在约束[2]

---

* 收稿日期：2010－11－23

基金项目：北京市自然科学基金资助项目（1942005）.

作者简介：李瑞洁（1974－），女，河南人，讲师，主要从事理论物理方面的研究. E－mali：nsylirui@sohu.com.

$$\phi_a^0(q^i,p_i)=0,(a=1,2,\cdots n-R),\tag{1}$$

其中 R 为 Hess 矩阵$\left[\frac{\partial^2 L}{\partial\dot{q}^i\partial\dot{q}^j}\right]$的秩. 由于$\frac{\partial H_C}{\partial\dot{q}^i}=0$,$H_C$ 仅为正则变量 q^i,p_i 的函数,对 H_C 变分可得[2]

$$\left(\dot{q}^i-\frac{\partial H_C}{\partial p_i}\right)\delta p_i-\left(\frac{\partial L}{\partial q^i}+\frac{\partial H_C}{\partial q^i}\right)\delta q^i=0.\tag{2}$$

当系统的运动还受到外在非完整约束(Chetaev 型)

$$G_s(q^i,\dot{q}^i)=0,(s=1,2,\cdots,m<R)\tag{3}$$

的限制时,位形空间中系统的运动方程为[6]

$$\frac{\partial L}{\partial q^i}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}^i}=\lambda^s\frac{\partial G_s}{\partial\dot{q}^i},\tag{4}$$

其中 $\lambda^s(t)$ 为 Lagrange 乘子. 假设由 $p_i=\frac{\partial L}{\partial\dot{q}^i}$ 解出的 $\dot{q}^i$ 代入(3)式,可使(3)式化为相空间约束 $G_s^0(q^i,p_i)=0$ 并与(1)式相容,且由 ϕ_a^0 和 G_a^0 导致的所有次级约束均彼此相容. 此时,$\frac{\partial G_s}{\partial\dot{q}^i}$化为 q^i,p_i 的函数,并记$\frac{\partial G_s}{\partial\dot{q}^i}\equiv G_{si}^0(q^i,p_i)$. 将(4)式代入(2)式,得

$$\left(\dot{q}^i-\frac{\partial H_C}{\partial p_i}\right)\delta p_i-\left(\dot{p}_i+\frac{\partial H_C}{\partial q^i}+\lambda^s G_{si}^0\right)\delta q^i=0,\tag{5}$$

由(1)式又有

$$\frac{\partial\phi_a^0}{\partial q^i}\delta q^i+\frac{\partial\phi_a^0}{\partial p_i}\delta p_i=0,\tag{6}$$

引入乘子 $\mu^a(t)$,由 Lagrange 乘子法则,从(5)、(6)式得

$$\dot{q}^i=\frac{\partial H_C}{\partial p_i}+\mu^a\frac{\partial\phi_a^0}{\partial p_i},\tag{7a}$$

$$\dot{p}_i=-\frac{\partial H_C}{\partial q^i}+\mu^a\frac{\partial\phi_a^0}{\partial q^i}-\lambda^s G_{si}^0,\tag{7b}$$

由(7)式,可得力学量 $F(q^i,p_i)$ 随时间的演化

$$\dot{F}=\frac{\partial F}{\partial q^i}\dot{q}^i+\frac{\partial F}{\partial p_i}\dot{p}_i=\{F,H_T\}+\frac{\partial F}{\partial p_i}G_i,(G_i=\lambda^s G_{si}^0),\tag{8}$$

其中 $H_T=H_C+\mu^a\phi_a^0$ 为总 Hamilton 量,$\{\cdot,\cdot\}$ 代表 Poisson 括号. 将 ϕ_a^0 和 G_a^0 作为初级约束[3,7],并统一记为 $\Phi_a^0=(\phi_a^0,G_a^0)$. 约束的自恰性要求,$\dot{\Phi}_\alpha^0=0$,也许可确定乘子 μ^a,λ^s,也可能导致次级约束:

$$\Phi_\alpha^1=\{\Phi_\alpha^0,H_T\}+\frac{\partial\Phi_\alpha^0}{\partial p_i}G_i=0,\tag{9}$$

次级约束的自恰性要求,可能导致其他次级约束

$$\Phi_\alpha^k=\{\Phi_\alpha^{k-1},H_T\}+\frac{\partial\Phi_\alpha^{k-1}}{\partial p_i}G_i=0,\tag{10}$$

这个过程直至

$$\Phi_\alpha^{m+1}=\{\Phi_\alpha^m,H_T\}+\frac{\partial\Phi_\alpha^m}{\partial p_i}G_i=G_{\alpha k}^\beta\Phi_\beta^k,(k\leqslant m)\tag{11}$$

为止,并设所有的约束 $\Phi_\alpha^k(k=0,1,\cdots,m)$ 均彼此相容. 这就是上述特定的附加非完整约束奇异 Lagrange 量系统求约束的修改 Driac - Bergmann 算法.

当附加约束为完整约束 $G_s(q^i)=0$ 时,其位形空间运动方程(4)式中右端应改为 $\lambda^s\frac{\partial G_s}{\partial q^i}$,此时正则方程为 $\dot{q}^i=\{q^i,H_T'\}$,$\dot{p}^i=\{p_i,H_T'\}$,其中 $H_T'=H_C+\mu^a\phi_a^0+\lambda^s G_s$. 从约束的自恰性求次级约束的 Dirac -

Bergmann 算法与传统算法相同(只要将原有的不含附加约束系统的 H_T 换为 H'_T 就是了)[3-4].

记附加约束奇异 Lagrange 量系统在相空间中所有约束为 $\{\Phi_\alpha^k\}$,其中第1类约束为 $\Lambda_l(q^i, p_i) = 0(l = 1,2,\cdots,A)$,第2类约束为 $\theta_j(q^i, p_i) = 0(j = 1,2,\cdots,B)$,按 Faddeev - Senjanovic 路径积分量子化方案[8],相应于每一个第1类约束须选取一规范条件 $\Omega_l(q^i, p_i) = 0(l = 1,2,\cdots,A)$,该系统 Green 函数的生成泛函可写为

$$Z[J] = \int Dq^i Dp_i \prod_{j,k,l} \delta(\theta_j)\delta(\Lambda_k)\delta(\Omega_l)\det|\{\Lambda_k,\Omega_l\}|\ [\det|\{\theta_i,\theta_j\}|]^{\frac{1}{2}} \exp\left\{i\int dt(p_i \dot{q}^i - H_C + J_i q^i)\right\}, \tag{12}$$

其中 J_i 为 q^i 的外源. 出现在上述路径积分中的数均为 C - 数,这为分析系统的量子对称性带来方便. 利用 δ - 函数和 Grassmann 变量 $\eta_i(t)$ 和 $\eta_i^+(t)$ 的积分性质,可将(12)式化为[9]

$$Z[J] = \int Dq^i Dp_i D\eta_i^+ D\eta_i D\lambda_m \exp\left\{i\int dt(L_{\text{eff}}^p + J_i q^i)\right\}, \tag{13}$$

其中

$$L_{\text{eff}}^p = L^p + L_m + L_{gh}, L^p = p_i \dot{q}^i - H_C, \tag{13a}$$

$$L_m = \lambda_j\theta_j + \lambda_k\theta_k + \lambda_l\Omega_l, \lambda_m = (\lambda_j, \lambda_k, \lambda_l), \tag{13b}$$

$$L_{gh} = \int d\tau\left[\eta_k^+(t)\{\Lambda_k\}(t), \Omega_l(\tau)\}\eta_l(\tau) + \frac{1}{2}\eta_i^+(t)\{\theta_j(t), \theta_j(\tau)\}\theta_j(\tau)\right]. \tag{13c}$$

2 约束奇异系统的正则对称性

先研究该系统的经典正则对称性. 设系统的正则作用量 $I^p = \int L^p dt$ 在无穷小整体变换

$$\begin{cases} t' = t + \Delta t = t + \varepsilon_\sigma \tau^\sigma(t, q^i, p_i), \\ q^{i\prime}(t') = q^i(t) + \Delta q^i(t) = q^i(t) + \varepsilon_\sigma \xi^{i\sigma}(t, q^i, p_i), \\ p_i'(t)' = p_i(t) + \Delta p_i(t) = p_i(t) + \varepsilon \eta_i^\sigma(t, q^i, p_i) \end{cases} \tag{14}$$

下不变,$\sigma = 1,2,\cdots,r$,ε_σ 为任意无穷小参数,τ^σ,$\xi^{i\sigma}\eta_i^\sigma$ 为给定函数. 由整体变换(14)下 I^p 不变 $\delta I^p = 0$,有[2]

$$\int\left\{\left(\dot{q}^i - \frac{\partial H_C}{\partial p_i}\right)\delta p_i + \left(-\dot{p}_i - \frac{\partial H_C}{\partial q^i}\right)\delta q^i + \frac{d}{dt}[p_i\delta q^i + (p_i\dot{q}^i - H_C)\Delta t]\right\}dt = 0, \tag{15}$$

假设变换(14)所确定的等时变分 $\delta q^i = \Delta q^i - \dot{q}^i\Delta t$ 分别适合(6)和

$$G_{si}^0 \delta q^i = 0, \tag{16}$$

引入乘子 $\mu^a(t)$ 和 $\lambda^s(t)$ 分别乘(6)式和(16)式,将所得结果与(15)式合并,利用运动方程(7)得非完整约束奇异 Lagrange 量系统的守恒量

$$p_i\xi^{i\sigma} - H_C\tau^\sigma = \text{const}, (\sigma = 1,2,\cdots,r) \tag{17}$$

可见对非完整约束奇异 Lagrange 量系统,当由 $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}$ 解出的 $\dot{q}^i$ 代入(3)式中,可使其化为相空间约束且与(1)式相容,就有该系统的正则 Noether 定理: 如果在(14)式变换下,系统的正则作用量不变,且变换(14)所确定的等时变分 δq^i 分别满足(6)式和(16)式,那么此非完整奇异 Lagrange 量系统在相空间中存在 r 个守恒量(17)式. 在经典水平下,这实际上给出了非完整力学系统的一种积分方法. 该方法对非完整约束正规 Lagrange 量系统(无内在约束)也适用.(16)式相应于约束加在虚位移上的条件.

下面研究该系统的量子对称性. 设系统有效正则作用量 $I_{\text{eff}}^p = \int L_{\text{eff}}^p dt = \int(p_i\dot{q}^i - H_{\text{eff}})dt$ 在(14)式变换下不变(此时 q^i 可以包含 q^i, η_i^+, η_i 等). 将(14)式中的 ε_σ 改为 $\varepsilon_\sigma(t)$,使其为一定域变换,而 $\varepsilon_\sigma(t)(\sigma = 1,2,\cdots,r)$ 为无穷小任意函数,它们及其微商在时间区间的端点为0,在此定域变换下,有效正则作用量的

变分为

$$\Delta I_{\mathrm{eff}}^{p} = \int\left\{\left(\dot{p}_i - \frac{\partial H_{\mathrm{eff}}}{\partial q^i}\right)\delta q^i + \left(\dot{q}^i - \frac{\partial H_{\mathrm{eff}}}{\partial p_i}\right)\delta p_i + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[p_i\delta q^i + (p_i\dot{q}^i - H_{\mathrm{eff}})\Delta t\right]\right\}\mathrm{d}t +$$
$$\int\left\{\left[p_i(\xi^{i\sigma} - \dot{q}^i\tau^\sigma) + (p_i\dot{q}^i - H_{\mathrm{eff}})\tau^\sigma\right]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\varepsilon_\sigma(t)\right\}\mathrm{d}t =$$
$$-\int\mathrm{d}t\varepsilon_\sigma(t)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[p_i(\xi^{i\sigma} - \dot{q}^i\tau^\sigma) + (p_i\dot{q}^i - H_{\mathrm{eff}})\tau^\sigma\right], \tag{18}$$

上式中利用了有效正则作用量在整体变换(14)下不变,(18)式第1个等式的第1项为0,并对第2项作分部积分,再利用$\varepsilon_\sigma(t)$的端点条件而得. 假设上述定域变换的Jacobi行列式为1,由生成泛函在该定域变换下的不变性,有

$$Z[J] = \int Dq^iDp_iDp_i\exp\left\{iI_{\mathrm{eff}}^p + i\int J_iq^i\mathrm{d}t\right\}\left(1 - i\int\mathrm{d}t\varepsilon_\sigma(t)\left\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[p_i(\xi^{i\sigma} - \dot{q}^i\tau^\sigma) + \right.\right.\right.$$
$$\left.\left.\left.(p_i\dot{q}^i - H_{\mathrm{eff}})\tau^\sigma\right] + J_i(\xi^{i\sigma} - \dot{q}^i\tau^\sigma)\right\}\right), \tag{19}$$

对(19)式关于$\varepsilon_\sigma(t)$求泛函微商,然后让外源$J_i = 0$,得

$$\langle 0|T^*(p_i\xi^{i\sigma} - H_{\mathrm{eff}}\tau^\sigma)|0\rangle = \mathrm{const}, \tag{20}$$

其中$|0>$代表系统的基态,T^*为一种特定的编时乘积[10]. 上式中H_{eff}包含了所有外在和内在约束甚至规范条件等. 可见,在整体变换(14)式下,如果附加约束奇异Lagrange量系统的有效正则作用量不变,且相应的定域变换的行列式为1,那么该系统在相空间存在量子守恒律(20)式. 此量子守恒律与经典正则Noether定理的守恒律相对应,后者守恒律中出现的是H_C,而前者则是H_{eff},这是由于系统存在外在和内在约束的量子化效应. 当变换(14)相应的定域变换的Jacobi行列式为1且有效正则作用量不变才存在守恒律(20). 这些都是与经典理论不同的. 经典理论中对称性所联系的守恒律,在量子理论中不一定再保持.

3 实 例

在前面的工作中[2],用其他方式研究了含附加非完整约束

$$G = a^2\dot{q}_1^2 - \dot{q}_1\dot{q}_2 - \dot{q}_2^2 = 0, \ (a\text{ 为常数}) \tag{21}$$

的奇异Lagrange量

$$L = \frac{1}{2}(\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2) + \frac{1}{2}q_3^2(q_1^2 + q_2^2) - q_3(q_1\dot{q}_2 - q_2\dot{q}_1) - \frac{1}{2}(q_1^2 + q_2^2) \tag{22}$$

系统的经典对称性,这里进一步研究系统的经典正则对称性,并给出它的路径积分量子化,讨论其量子对称性质.

由Lagrange量(22)式求出系统的正则动量分别为

$$p_1 = \frac{\partial L}{\partial\dot{q}_1} = \dot{q}_1 + q_3q_2, \quad p_2 = \dot{q}_2 - q_3q_1, \quad p_3 = 0, \tag{23}$$

相空间固有初级约束为

$$\phi^0 = p_3 = 0, \tag{24}$$

正则Hamilton量为

$$H_C = p_i\dot{q}^i - L = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) - q_3(q_1p_2 - q_2p_1) + \frac{1}{2}(q_1^2 + q_2^2). \tag{25}$$

将(23)式中的$\dot{q}_1$和$\dot{q}_2$代入非完整约束(21)式,可将(21)式用正则变量表出的相空间约束

$$G^0 = a^2(p_1 - q_2q_3)^2 - (p_1 - q_2q_3)(p_2 + q_1q_3) - (p_2 + q_1q_3)^2 = 0. \tag{26}$$

将(24)式和(26)式作为系统在相空间的初级约束[7],按上述修改的Dirac-Bergmann算法(9)式,ϕ^0和G^0的自恰性要求$\dot{\phi}^0 = 0$和$\dot{G}^0 = 0$分别导致确定Lagrange乘子的方程,不产生任何次级约束,且

$$\{\phi^0, G^0\} = 2a^2q_2(p_1 - q_2q_3) + q_1p_1 - q_2p_2 - 2q_1q_2q_3 + 2q_1(p_2 + q_1q_3), \tag{27}$$

可见,ϕ^0 和 G^0 均为第 2 类约束. 按 Faddeev – Senjanovic 路径积分量子化方案,此系统 Green 函数的生成泛函为

$$Z[J] = \int Dq^i Dp_i D\lambda_m D\eta_i^+ D\eta_j \delta(\phi^0)\delta(G^0) \sqrt{\det|\{\phi^0, G^0\}|}\left\{i\int dt(p_i\dot{q}^i - H_C + J_i q^i)\right\} =$$

$$\int Dq^i Dp_i D\lambda_m D\eta_i^+ D\eta_j \exp\left\{i\int dt(L_{\text{eff}}^p + J_i q^i)\right\}, \tag{28}$$

其中

$$L_{\text{eff}}^p = L^p + L_f + L_g \tag{29a}$$

$$L^p = p_i\dot{q}^i - H_C, L_f = \lambda_1\phi^0 + \lambda_2 G^0, (\lambda_1, \lambda_2 \text{ 为乘子}) \tag{29b}$$

$$L_g = \frac{1}{2}\int d\tau \eta_i^+(t)\{\theta_i(t), \theta_j(\tau)\}\eta_j(t), (\theta_1 = \phi^0, \theta_2 = G^0) \tag{29c}$$

其中$\{\theta_i, \theta_j\}$ 可由$\{\phi^0, \phi^0\}$, $\{\phi^0, G^0\}$, $\{G^0, G^0\}$ 的 Poisson 括号给出.

时间平移变换($\xi^{i\sigma} = 0, \tau^\sigma = 1$) 下,有效 Lagrange 量 L_{eff}^p 不变,且正则变量变换的 Jacobi 行列式为 1,由(20) 得到的量子守恒荷为

$$< 0|T^* H_{\text{eff}}|0 > = \text{const}, \tag{30}$$

而在经典理论中,时间平移变换下,系统的 Lagrange 量(22) 和约束(21) 均不变,由 $\Delta q^i = \delta q^i + \dot{q}^i\Delta t$ 以及约束的稳定性(自恰性) 条件,注意到(21) 式是 $\dot{q}^i$ 的二次齐次函数,可见时间平移变换下,δq^i 分别满足(6) 式和(16) 式[2]. 此系统时间平移不变性导致的守恒量由(20) 式为正则 Hamilton 量 H_C. 在量子情形,即使是沿约束超曲面 $\phi^0 = 0$ 和 $G^0 = 0$,其有效 Hamilton 量 H_{eff} 也不同于正则 Hamilton 量 H_C,这是由于系统存在附加非完整约束,量子化后出现"鬼量"$\eta_i^+(t)$ 和 $\eta_j(t)$(反对易 C – 数) 的缘故. 相应于非 Abel 规范场量量子化后出现的"鬼粒子",对量子系统的能量、动量和角动量有贡献[2,9]. 此例子表明经典理论中的对称性和守恒量的关系在量子理论中不再保持,出现所谓"量子反常",此反常的出现曾被认为是由于对称变换下,路径积分测度非不变的结果[11],上述结果说明,反常也可出现在对称变换下路径积分测度不变的情形.

4 结果和讨论

本文研究含附加约束奇异 Lagrange 量有限自由度系统的相空间路径积分量子化和正则对称性. 通过实例分析了系统的经典对称性和守恒量的关系在量子理论中不一定再保持. 将这一讨论推广到场论中含附加约束系统的量子化是直接的[12]. 场论的附加约束中场量可不含时间微商(如非线性 σ 模型,CP^1 – 模型等),也可以含时间微商,如在研究电磁波在介质分界面附近的性质时,是将电磁场在分界面上的边界条件作为约束来处理的[5,13],边界条件用矢势 A_μ 来表达时,就会出现场量的时间微商 $\dot{A}_\mu$, $\dot{A}_\mu$ 且可用电磁场的正则变量表达,其相空间量子化可类似地进行研究.

参考文献:

[1] DIRAC P A M. Lecture on quantum mechanics [M]. New York: Yeshiva University, 1964.

[2] LI Z P, JIANG J H. Symmetries in constrained canonical systems [M]. 北京: 科学出版社, 2002.

[3] 张莹,李爱民,李子平. 含 Hopf 项和 Maxwell – Chern – Simons 项 O(3) 非线性 σ 模型的分数自旋和分数统计性质 [J]. 物理学报, 2005, 54(1): 43-46.

[4] 张莹,李子平. 非 Abel Chern – Simons 理论中量子水平的分数自旋性质 [J]. 物理学报, 2005, 54(6): 2 611-2 613.

[5] LI Zi-ping, WU B C. Symmetry in extended phase space for singular Lagrangian with subsidiary constraints [J]. Int J Theor Phys, 1994, 33(5): 1 063-1 075.

[6] 梅凤翔. 非完整系统力学基础 [M]. 北京: 北京理工学院出版社, 1985.

(下转第 427 页)

The structure and potential energy function for the ground state of the $PCl^n(n=-1,0,+1)$

XIAO Xia-jie[1,2], HAN Xiao-qin[3]

(1. Department of Physics, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China;
2. Henan Quality Polytechnic, Pingdingshan 467000, China;
3. Department of Physics, Shangqiu Normal College, Shangqiu 476000, China)

Abstract: Based on the Gaussian03 calculation software, the density functional theory UB3LYP and UB3P86, configuration interaction method UCCSD-FC and UQCISD-FC have been used to optimize the possible ground-state structures of PCl molecule, PCl^+ and PCl^- molecule ion with the 6-311++g(df,pd) basis sets respectively. Frequency and single-point energy scan for $PCl^n(n=-1,0,+1)$ have been calculated. Spectral parameters ($B_e, \alpha_e, \omega_e, \omega_e\chi_e$) of the PCl molecule and PCl^+ ion ground state are obtained by least square fitting to the Murrell-Sorbie function. The results of calculation are in good agreement with experimental data. In this work, spectral parameters ($B_e, \alpha_e, \omega_e, \omega_e\chi_e$) of PCl^- and force constants (f_2, f_3, f_4) of $PCl^n(n=-1,0,+1)$ molecule ion for ground state are shown for the first time. This calculation may provide important theoretical basis for investigation and further study of $PCl^n(n=-1,0,+1)$.

Key words: $PCl^n(n=-1,0,+1)$ molecule ion; structure; potential energy function

* *

(上接第 421 页)

[7] BANERJEE R. Gauge-independent analysis of O(3) nonlinear sigma model with Hopf and Chern-Simons term [J]. Nucl Phys, 1994, B419: 611-631.

[8] SENJANOVIC P. Path integral quantization of field theories with second-class constraints [J]. Ann Phys, 1976, 100: 227-261.

[9] LI Zi-ping. Global quantal canonical symmetry properties for a system with a singular Lagrangian(in Chinese) [J]. Acta Phys Sin, 1996, 45(10): 1 601-1 608.

[10] SUURA H, YOUNG B L. Derivation of general conservation laws and Ward-Takahashi identities in the functional integration method [J], Phys Rev D, 1973, 8: 4 353-4 371.

[11] FUJIKAWA K. Comment on chiral and conformal anomalies [J]. Phys Rev Lett, 1980, 44: 1 733-1 736.

[12] 李子平. 约束系统的对称变换 [J]. 物理学报, 1981, 30(12): 1 699-1 706.

[13] 李爱民, 李子平. 规范不变系统量子水平的变换性质及应用 [J]. 物理学报, 2008, 57(12): 7 571-7 576.

The quanum theory on a system with a singular lagrangian containing subsidiary constraints

LI Rui-jie[1], LI Zi-ping[2]

(1. Department of Mathematics and Physics, North China Electric Power University, Beijing 102206, China;
2. Collage of Applied Science, Beijing University of Technology, Beijing 100022, China)

Abstract: The quantization for a singular Lagrangian systems with subsidiary constrained has been studied. A modified Dirac-Beigmann algorithm for this constrained system has been formulated. The path-integral quantization and canonical symmetry both at the classical and quantum level of those systems also have been discussed. An example has been given to illustrate that the connection between the symmetry and conservation laws in classical theories is not always valid in the quantum theory.

Key words: constrained Hamiltonian system; subsidiary constraint; quantum theory; conservation law