0. 量子力学基本原理回顾

1. Hamiltonian H, $H|E\rangle = E|E\rangle$

2. Hilbert space 中矢量 $|\alpha\rangle \to$ 态. 维度: 独立 $|E\rangle$ 的个数

3. 力学量 Q 是厄密算符 (包括 H): $Q = Q^{+}$

$$Q|\alpha\rangle \longleftrightarrow \langle\alpha|Q^{+} \quad 或 \quad \langle\alpha|Q|\beta\rangle = \langle\beta|Q|\alpha\rangle^{*}$$

$$\langle\alpha|Q\beta\rangle = \langle Q\beta|\alpha\rangle^{*} = (\psi_\alpha, Q\psi_\beta) = (Q\psi_\beta, \psi_\alpha)^{*}$$

a. 本征值是实. b. 本征矢正交.

4. 测量. $Q|q_i\rangle = q_i|q_i\rangle$, $\langle q_i|q_j\rangle = \delta_{ij}$

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i|q_i\rangle, \quad 测 Q 得 q_i, 几率 |c_i|^2.$$

$$\langle Q\rangle = \sum_i |c_i|^2 q_i = \langle\psi|Q|\psi\rangle.$$

哈密顿理论力学: $\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$, $\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$

泊松括号 $\longrightarrow$ 对易关系: $[x, p] = i\hbar$

H picture, H eq. $\frac{dQ}{dt} = +\frac{1}{i\hbar}[Q, H]$. $\frac{d|\alpha\rangle}{dt} = 0$.

S picture S eq: $i\hbar\frac{\partial|\alpha\rangle}{\partial t} = H|\alpha\rangle$. $\frac{dQ}{dt} = 0$,

$$\frac{d}{dt}\langle\alpha|Q|\alpha\rangle = +\frac{1}{i\hbar}\langle\alpha|[Q, H]|\alpha\rangle$$

坐标表象: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle x|\alpha\rangle = \langle x|H(\hat{x}, \hat{p})|\alpha\rangle$

$$= H\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\langle x|\alpha\rangle$$

$\psi(x) = \langle x|\alpha\rangle$

Chapter 2

粒子在电磁场中的运动

过去写H, 在没有磁场时可以直接写出势能; 但是有磁场时，我们用磁偶极势能，是近似。

例如描写氢原子中电子的运动，$H = T + V$, $V = -e^2/r$. 加上Zeeman场后, $V = -e^2/r - \mu \cdot B$.

由于电子约束在质子的势场中，与质子形成了磁偶极子，这是可行的。

如果要描述自由电子在电磁场中的运动，这样就不够了，比如无法描述电子受到洛伦兹力的运动.

2.1 带电粒子在电磁场中的Schrödinger 方程

带电粒子在电磁场中的运动可以用牛顿方程描述。

$$\mu\ddot{\vec{r}} = \vec{F} = q(\vec{E} + \frac{\dot{\vec{r}}}{c} \times \vec{B}) \tag{2.1}$$

其中Lorentz 力无法表达成势能函数的梯度！

怎样用Hamiltonian量描述粒子在电磁场中的运动?

引入矢势$\mathbf{A}$ 和电势ϕ, 那么

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla\phi, \tag{2.2}$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \tag{2.3}$$

于是

$$\mu\ddot{\vec{r}} = -q(\nabla\phi + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}) + \frac{q}{c}\dot{\vec{r}} \times (\nabla \times \vec{A}) \tag{2.4}$$

只要定义

$$H = \frac{1}{2\mu}(\vec{P} - \frac{q}{c}\vec{A})^2 + q\phi \tag{2.5}$$

利用

$$\dot{\vec{r}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{P}} \tag{2.6}$$

$$\dot{\vec{P}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} \tag{2.7}$$

即可导出(2.4)式.

由(2.6)：$\mu\dot{\vec{r}} = \vec{P} - \frac{q}{c}\vec{A}$, 即$\vec{P}$不是$\mu\dot{\vec{r}}$. $\vec{P} = \mu\dot{\vec{r}} + \frac{q}{c}\vec{A}$, 它是正则动量，而动量$\mu\dot{\vec{r}} \equiv \vec{\pi}$可称为机械动量.

对机械动量再求时间导数，我们有

$$\mu\ddot{\vec{r}} = \dot{\vec{P}} - \frac{q}{c}\dot{\vec{A}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} - \frac{q}{c}\dot{\vec{A}} \tag{2.8}$$

看x分量：

$$\begin{aligned}
\mu\ddot{x} &= \frac{1}{\mu}(\vec{P} - \frac{q}{c}\vec{A}) \cdot \frac{q}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial x} - q\frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{q}{c}\dot{A}_x \\
&= \frac{q}{c}\dot{\vec{r}} \cdot \frac{\partial \vec{A}}{\partial x} - q\frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{q}{c}(\frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{\vec{r}} \cdot \nabla A_x) \\
&= -q(\frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}) + \frac{q}{c}(\dot{\vec{r}} \cdot \frac{\partial \vec{A}}{\partial x} - \dot{\vec{r}} \cdot \nabla A_x) \\
&= -q(\nabla\phi + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t})_{x\text{分量}} + \frac{q}{c}[\dot{\vec{r}} \times (\nabla \times \vec{A})]_{x\text{分量}}
\end{aligned}$$

即

$$\mu\ddot{\vec{r}} = -q(\nabla\phi + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}) + \frac{q}{c}\dot{\vec{r}} \times (\nabla \times \vec{A}) \tag{2.9}$$

以上推导用到矢量公式：

$$\frac{\partial}{\partial x}(\vec{A} \cdot \vec{A}) = 2\vec{A} \cdot \frac{\partial \vec{A}}{\partial x}$$

以及

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \dot{\vec{r}} \cdot \nabla A$$

这样我们用哈密顿方程得到了方程(2.4).

有了哈密顿，我们就可以写出薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha\rangle = H|\alpha\rangle \tag{2.10}$$

在x表象下化为

$$\langle x|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha\rangle = \langle x|H|\alpha\rangle \tag{2.11}$$

设$\psi(x) = \langle x|\alpha\rangle$为波函数。按标准作法，将哈密顿量(2.5)中$\vec{P}$代换为$-i\hbar\nabla$, 就可以写出

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = [\frac{1}{2\mu}(-i\hbar\nabla - \frac{q}{c}\vec{A})^2 + q\phi]\psi \tag{2.12}$$

此即为电磁场中带电粒子的Schrödinger equation.

几点说明

- 矢势与正则动量不一定对易

$$(\vec{P} \cdot \vec{A})\psi = [(-i\hbar\nabla) \cdot \vec{A}]\psi + \vec{A} \cdot (-i\hbar\nabla)\psi$$

即
$$[\vec{P},\vec{A}]=\vec{P}\cdot\vec{A} \tag{2.13}$$
一般情况下不对易.

但是在横场条件$\nabla\cdot\vec{A}=0$, 即库伦规范下, $[\vec{P},\vec{A}]=0$. 此时
$$(\vec{P}-\frac{q}{c}\vec{A})^2=P^2+\frac{q^2}{c^2}A^2-\frac{q}{c}(\vec{P}\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\vec{P})=P^2+\frac{q^2}{c^2}A^2-\frac{q}{c}(2\vec{P}\cdot\vec{A})$$

•不影响波函数的几率解释

我们还可以推导出
$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\vec{j}=0 \tag{2.14}$$
不过其中将$\vec{j}$定义中$\vec{P}$ 换成$\vec{P}-\frac{q}{c}\vec{A}$, 即使用机械动量.
$$\begin{aligned}\vec{j} &= \frac{1}{2\mu}(\psi^*(P-qA/c)\psi+\psi(P-qA/c)^*\psi^*)\\ &= \frac{-i\hbar}{2\mu}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi*)-\frac{q}{\mu c}A\rho \end{aligned}\tag{2.15}$$

对于$\vec{j}$还有一个计算公式，是利用
$$\psi=\sqrt{\rho}e^{iS/\hbar} \tag{2.16}$$
得到
$$\vec{j}=\frac{\rho}{\mu}(\nabla S) \tag{2.17}$$
将$\vec{P}$ 换成$\vec{P}-\frac{q}{c}\vec{A}$,
$$\vec{j}=\frac{\rho}{\mu}(\nabla S-\frac{qA}{c}) \tag{2.18}$$