§粒子在电磁场中的运动

我们已经熟悉了 $H=\frac{p^2}{2m}+V$. $V=-\frac{Ze^2}{r}$，带电粒子在电场中

或者，$V=-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$，描述粒子轨道+自旋导致磁矩，在磁场中有势能。$\vec{\mu}\sim\vec{L}+2\vec{S}$

问题：带电粒子在电磁场中的运动的更一般的描述？

经典的牛顿力学：$m\ddot{\vec{r}}=q(\vec{E}+\frac{\dot{\vec{r}}}{c}\times\vec{B})$ → Lorentz

写成哈密顿形式的经典力学，试图"量子化"。

但是 Lorentz 力不能写成 V 的梯度！→ 简单的 $H=\frac{p^2}{2m}+V$ 行不通。

已知：$\vec{E}=-\nabla\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}$

$\vec{B}=\nabla\times\vec{A}$

$\vec{A}$ 和 ϕ 是矢势和电势，于是

$$m\ddot{\vec{r}}=-q\left(\nabla\phi+\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}\right)+\frac{q}{c}\dot{\vec{r}}\times(\nabla\times\vec{A}) \quad (A)$$

下面我们证明，若令 $\boxed{H=\frac{1}{2m}(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A})^2+q\phi}$

则可根据，哈密顿方程 $\dot{\vec{r}}=\frac{\partial H}{\partial\vec{p}}$ 与 $\dot{\vec{p}}=-\frac{\partial H}{\partial\vec{r}}$
导出 (A) 式。

首先我们发现，$\boxed{m\dot{\vec{r}}=\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A}}$ $\left(\frac{\partial(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A})^2}{\partial p_x}=2(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A})\cdot(1,0,0)\right)$

用到：$\left(\frac{\partial H}{\partial\vec{p}}=\left(\frac{\partial H}{\partial p_x},\frac{\partial H}{\partial p_y},\frac{\partial H}{\partial p_z}\right)\right)$

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

$m\dot{\vec r}$ 是我们通常的动量，称为机械动量 $\vec\pi$，$\vec p$ 不等于 $m\dot{\vec r}$，为正则动量.

再对 $\vec\pi$ 求导：$\frac{d\vec\pi}{dt} = \dot{\vec\pi}$ 第2个正则方程.

$$m\ddot{\vec r} = \dot{\vec p} - \frac{q}{c}\dot{\vec A} = -\frac{\partial H}{\partial \vec r} - \frac{q}{c}\dot{\vec A}$$

我们观察 x 分量：$\frac{\partial H}{\partial \vec r} = \left(\frac{\partial H}{\partial x}, \frac{\partial H}{\partial y}, \frac{\partial H}{\partial z}\right)$

$$m\ddot x = -q\left(\frac{\partial\phi}{\partial x} + \frac{1}{c}\frac{dA_x}{dt}\right) + \frac{1}{m}\underline{\left(\vec p - \frac{q}{c}\vec A\right)}\cdot\frac{q\partial\vec A}{c\partial x}$$

注意：$\vec p - \frac{q}{c}\vec A = m\dot{\vec r}$，　用到 $\frac{\partial(\vec A\cdot\vec A)}{\partial x} = 2\vec A\cdot\frac{\partial\vec A}{\partial x}$

再利用 $\frac{dA_x}{dt} = \frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{\vec r}\cdot\nabla A_x$

$$m\ddot x = -q\left(\frac{\partial\phi}{\partial x} + \frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}\right) + \frac{q}{c}\left(\dot{\vec r}\cdot\frac{\partial\vec A}{\partial x} - \dot{\vec r}\cdot\nabla A_x\right)$$

$$= -q\left(\nabla\phi + \frac{1}{c}\frac{\partial\vec A}{\partial t}\right)_x + \frac{q}{c}\left[\dot{\vec r}\times(\nabla\times\vec A)\right]_x$$

用到：$(\vec A\times\vec B)_x = A_y B_z - A_z B_y$

设 $\vec B = \nabla\times\vec A$，　$(\nabla\times\vec A)_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}$，

$(\nabla\times\vec A)_y = -\frac{\partial A_z}{\partial x} + \frac{\partial A_x}{\partial z}$

又：$\dot{\vec r}\cdot\frac{\partial\vec A}{\partial x} - \dot{\vec r}\cdot\nabla A_x = \dot y\frac{\partial A_y}{\partial x} + \dot z\frac{\partial A_z}{\partial x} + \dot x\frac{\partial A_x}{\partial x} - \dot y\frac{\partial A_x}{\partial y} - \dot z\frac{\partial A_x}{\partial z} - \dot x\frac{\partial A_x}{\partial x}$

我们导出了 (A) 式.

就称作"量子化".

有了哈密顿量，我们可以写出 Schrödinger Eq.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha\rangle = H|\alpha\rangle, \quad H=\frac{1}{2m}\left(P-\frac{q}{c}A\right)^2+q\phi.$$

在坐标表象下， $\langle x'|\alpha\rangle = \psi(x')$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x')=\hat H\psi(x').$$

$$\hat H=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\vec A\right)^2+q\phi,$$

即用 $-i\hbar\nabla$ 代替 $\vec p$，此步称为量子化.

$\vec x$ 不变，或 $\vec x\to\vec x'$.

几点说明：

1. $$\vec p\cdot\vec A\psi=[(-i\hbar\nabla)\cdot\vec A]\psi+\vec A\cdot(-i\hbar\nabla)\psi$$

即 $[\vec p,\vec A]=\vec p\cdot\vec A$ 不对易

易：由 $[x,p]=i\hbar$ $\Rightarrow \vec p\cdot\vec A(\vec x)=-i\hbar\nabla\cdot\vec A+\vec A\cdot\vec p$ $\Rightarrow \langle x|\vec p\cdot\vec A|\alpha\rangle=(-i\hbar\nabla\cdot\vec A)\psi_\alpha+\vec A\cdot(-i\hbar\nabla)\psi_\alpha$

注：以上默认了 $\langle x|\vec p\cdot\vec A|\alpha\rangle=-i\hbar\nabla\cdot\vec A(\vec x)\psi_\alpha(\vec x)=-i\hbar\nabla\cdot(\vec A(\vec x)\psi_\alpha(\vec x))$

2. $\vec A$ 是规范场，在 $\nabla\times\vec A=\vec B$ 的条件下，可选 $\nabla\cdot\vec A=0$
即库仑规范，则 $[\vec p,\vec A]=0$.

3. 满足电磁场中 S-eq 的波函数，仍有

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\vec j=0.$$

其中 $\rho=\psi^*\psi$,

(证明：令 $\nabla'=\nabla-iA$，则 $\hat\pi=-i\nabla'$, $\pi^2=-\nabla'^2$

$-\nabla'^2=-\nabla^2+iA\cdot\nabla+i\nabla\cdot A+A^2$)

以上略去 $\frac{q}{c}$.

$\pi^*=i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\vec A$

$$\vec j=\frac{1}{2m}(\psi^*\vec\pi\psi+\psi\vec\pi^*\psi^*)$$

$$=\frac{-i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)-\frac{q}{mc}A\rho$$

4. 设 $\psi=\sqrt\rho\, e^{iS/\hbar}$，则 $\vec j=\frac{\rho}{m}\nabla S$ ($\vec A=0$时)，电磁场中 $\vec j=\frac{\rho}{m}(\nabla S-\frac{qA}{c})$

细节：$\langle x|(\vec{p}-\frac{q}{c}\vec{A})|\alpha\rangle = (-i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\vec{A})\langle x|\alpha\rangle = (-i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\vec{A})\psi_\alpha(x)$

$$\begin{aligned}\langle x|(\vec{p}-\tfrac{q}{c}\vec{A})^2|\alpha\rangle &= (-i\hbar\nabla-\frac{q\vec{A}}{c})\langle x|(\vec{p}-\tfrac{q}{c}\vec{A})|\alpha\rangle \\ &= (-i\hbar\nabla-\frac{q\vec{A}}{c})(-i\hbar\nabla-\frac{q\vec{A}}{c})\psi_\alpha(x) \\ &= (-i\hbar\nabla-\frac{q\vec{A}}{c})^2\psi_\alpha(x)\end{aligned}$$

(2024)

补充：坐标表象下算符的表示

基矢 $|x\rangle$，满足 $\langle x_1|x_2\rangle = \delta(x_1-x_2)$

$$\int dx' |x'\rangle\langle x'| = \mathbb{1}$$

考虑 $x|\alpha\rangle = |\beta\rangle \Rightarrow \langle x'|x|\alpha\rangle = \langle x'|\beta\rangle = \psi_\beta(x')$

希望将左边写成：$\hat{x}\,\psi_\alpha(x')$，$\hat{x}$ 即算符 x 的"表示"

由于 $\langle x'|x|\alpha\rangle = \int dx'' \langle x'|x|x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle$

$$= \int dx''\, x'' \langle x'|x''\rangle \psi_\alpha(x'')$$

$$= x'\psi_\alpha(x')$$

因此：$\hat{x} = x'$

动量算符 p 的"表示"是什么？可以从基本对易式 $[x,p]=i\hbar$ 导出

$$xp - px = i\hbar \Rightarrow \langle x'|(xp-px)|\alpha\rangle = i\hbar\langle x'|\alpha\rangle$$

$$x'\langle x'|p|\alpha\rangle - \langle x'|p\cdot x|\alpha\rangle = i\hbar\,\psi_\alpha(x')$$

$\langle x'|p|\alpha\rangle = \hat{p}\,\psi_\alpha(x')$，$\hat{p}$ 是我们在找的"表示".

$\langle x'|p\cdot x|\alpha\rangle = \hat{p}\langle x'|x|\alpha\rangle = \hat{p}\,(x'\psi_\alpha(x'))$

可见，$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}$

我们也可以从承认动量本征态 $|p'\rangle$ 的波函数 $\langle x'|p'\rangle = \frac{e^{\frac{ip'x'}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ 出发导出 $\hat{p}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}$

考虑 $p|\alpha\rangle = |\beta\rangle \Rightarrow \langle x'|p|\alpha\rangle = \langle x'|\beta\rangle = \psi_\beta(x')$

左边记为 $\hat{p}\,\psi_\alpha(x')$，$\hat{p}$ 是我们在求的 p 的表示.

$$\langle x'|p|\alpha\rangle = \int dp' \langle x'|p|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle$$

$$= \int dp'\, p' \langle x'|p'\rangle \langle p'|\alpha\rangle = \int dp'\, p' \frac{e^{\frac{ip'x'}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle p'|\alpha\rangle$$

$$= \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)\int dp' \langle x'|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)\langle x'|\alpha\rangle$$

$$= \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi_\alpha(x')$$

因此 $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}$.

有了 $\hat{x}$ 与 $\hat{p}$，自然 $\hat{x}\hat{p}\,\psi(x') - \hat{p}\hat{x}\,\psi(x') = i\hbar\,\psi(x')$

$\Rightarrow [\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}] = i\hbar$ （注意后面要跟 WF）

最后：任意 $F(x,p)$ 算符的表示 $=$？

考虑 $\langle x'|F(x,p)|\alpha\rangle = \langle x'|\beta\rangle = \psi_\beta(x')$

寻找 $\hat{F}$： $\hat{F}\,\psi_\alpha(x') = \psi_\beta(x')$

自然 $\hat{F} = F(\hat{x},\hat{p})$：保持函数关系 $x \to \hat{x} = x'$，$p \to \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$