

第七章 粒子在位置空间中的运动 V

带电粒子在电磁场中的运动

前面讨论过的氢原子可以视作带电粒子在 Coulomb 场中的运动. 还可以考虑以下情况:

1. 带电量为 q 的粒子在匀强电场中的运动, 哈密顿量是

$$H = \frac{P^2}{2m} - q\mathbf{E} \cdot \mathbf{R}$$

设 $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_z$

$$= \frac{P_x^2}{2m} + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{P_z^2}{2m} - qEZ$$

哈密顿量中与 z 方向有关的部分 $\frac{P_z^2}{2m} - qEZ$ 描述的是线性势场中的运动, 在动量表象中容易求解. 在位置表象中的波函数与 Airy 函数有关.

2. 带电谐振子在匀强电场 $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_z$ 中的运动, 哈密顿量为

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 R^2 - qEZ$$

在 z 方向上的运动相当于平衡位置平移了的谐振子的运动.

3. 具有一定自旋的粒子在磁场中的运动, 典型的问题是 SG 实验. 关于 SG 实验的更细致的讨论, 参看

- D. E. Platt, American Journal of Physics **60**, 306 (1992).
- G. Potel, F. Barranco, S. Cruz-Barrios, and J. Gómez-Camacho, Physical Review A **71**, 052106 (2005).

4. 无自旋带电量 q 的粒子在匀强磁场中的运动.

下面着重分析无自旋的带电粒子在电磁场中的运动.

微观粒子的质量为 m , 带电量为 q . 电场 \mathbf{E} , 磁场 \mathbf{B} . 标量势 ϕ , 矢量势 \mathbf{A} .

经典情形

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}$$

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

对于给定的场强 \mathbf{E} 和 \mathbf{B} , 可以有多种不同的 ϕ 和 \mathbf{A} 与之对应,

$$\mathbf{A} \longrightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi, \quad \phi \longrightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial\chi}{\partial t},$$

其中 $\chi = \chi(\mathbf{r}, t)$. 规范变换不影响场强.

Lagrange 量

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}mv^2 - q\phi(\mathbf{r}, t) + q\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t),$$

其中 $\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$.

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial v_k} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r_k} = 0$$

⇓

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = q (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

正则 (canonical) 动量

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}. \quad (1)$$

Hamilton 量

$$H = \mathbf{v} \cdot \mathbf{p} - \mathcal{L} = \frac{1}{2}Mv^2 + q\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi. \quad (2)$$

量子情形

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{P} - q\mathbf{A})^2 + q\phi, \quad \mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{R}, t), \quad \phi = \phi(\mathbf{R}, t) \quad (3)$$

速度算子 \mathbf{V} ,

$$\mathbf{V} = \frac{\text{机械动量算子}}{m} = \frac{1}{m}(\mathbf{P} - q\mathbf{A}).$$

考虑与速度算子有关的对易关系.

$$\begin{aligned} [R_j, V_k] &= \frac{i\hbar}{m}\delta_{jk} \\ [V_x, V_y] &= \frac{1}{m^2}[P_x, P_y] + \left(\frac{q}{m}\right)^2[A_x, A_y] - \frac{q}{m^2}\{[A_x, P_y] + [P_x, A_y]\} \\ &= -\frac{q}{m^2}\{[A_x, P_y] + [P_x, A_y]\} \\ &= -i\frac{\hbar q}{m^2} \left\{ \frac{\partial A_x}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial x} \right\} \\ &= \frac{i\hbar q}{m^2}(\nabla \times \mathbf{A})_z = \frac{i\hbar q}{m^2}B_z \\ [V_j, V_k] &= \frac{i\hbar q}{m^2}\epsilon_{jkl}B_\ell \end{aligned}$$

其中 ϵ_{jkl} 是

$$\epsilon_{jkl} = \begin{cases} +1 & \text{当 } jkl = 123 \text{ 的偶数次置换} \\ -1 & \text{当 } jkl = 123 \text{ 的奇数次置换} \\ 0 & \text{当 } j, k, l \text{ 中至少两个是相等的} \end{cases}$$

速度算子期望值的运动方程 我们知道, 某个力学量 O 的期望值随时间变化的方程是

$$\frac{d}{dt}\langle O \rangle(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle [O, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial O}{\partial t} \right\rangle.$$

这里, 期望值是针对 $|\psi(t)\rangle$ 而言的. 考虑 $O = V_k$.

$$\begin{aligned} V_k &= \frac{1}{m} \left(P_k - qA_k \right) \\ H &= \frac{1}{2} m V^2 + q\phi = \frac{1}{2m} (\mathbf{P} - q\mathbf{A})^2 + q\phi \\ [V_k, H] &= \frac{1}{2} m \sum_j [V_k, V_j^2] + q[V_k, \phi] \\ &= \frac{1}{2} m \sum_j \left\{ V_j [V_k, V_j] + [V_k, V_j] V_j \right\} + \frac{q}{m} [P_k, \phi] \\ &= \frac{i}{2} \frac{\hbar q}{m} \sum_{j,\ell} (V_j \epsilon_{k j \ell} B_\ell + \underline{\epsilon_{k j \ell} B_\ell V_j}) - \frac{q}{m} i \hbar (\nabla \phi)_k \\ &= \frac{i}{2} \frac{\hbar q}{m} \sum_{j,\ell} \epsilon_{k j \ell} (V_j B_\ell \underline{-B_j V_\ell}) - \frac{q}{m} i \hbar (\nabla \phi)_k \end{aligned}$$

对于上面计算的最后两步, 补充一个步骤:

$$\sum_{j,\ell} \epsilon_{k j \ell} B_\ell V_j = - \sum_{j,\ell} \epsilon_{k \ell j} B_\ell V_j = - \sum_{j,\ell} \epsilon_{k j \ell} B_j V_\ell$$

可以看一个具体的形式.

$$\begin{aligned} [V_1, H] &= \frac{i}{2} \frac{\hbar q}{m} (V_2 B_3 - B_2 V_3 - V_3 B_2 + B_3 V_2) - \frac{q}{m} i \hbar (\nabla \phi)_1 \\ &= \frac{i}{2} \frac{\hbar q}{m} (\mathbf{V} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \mathbf{V})_1 - \frac{q}{m} i \hbar (\nabla \phi)_1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} [V_1, H] + \frac{\partial V_1}{\partial t} &= \frac{q}{2m} (\mathbf{V} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \mathbf{V})_1 - \frac{q}{m} (\nabla \phi)_1 - \frac{q}{m} \frac{\partial A_1}{\partial t} \\ &= \frac{1}{2} \frac{q}{m} (\mathbf{V} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \mathbf{V})_1 + \frac{q}{m} E_1 \end{aligned}$$

$$\left\langle m \frac{d\mathbf{V}}{dt} \right\rangle = q \langle \mathbf{E} \rangle + \frac{1}{2} q \langle \mathbf{V} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \mathbf{V} \rangle$$

可以类比于经典情形下的运动方程.

机械角动量算子 定义

$$\mathbf{A} = m\mathbf{R} \times \mathbf{V}$$

这是机械角动量算子.

计算对易子

$$[\Lambda_x, \Lambda_y] = m^2 [YV_z - ZV_y, ZV_x - XV_z]$$

$$\begin{aligned}
&= i\hbar(-mYV_x + qYZB_y + qZ^2B_z + qXZB_x + mXV_y) \\
&= i\hbar(\Lambda_z + qZ\mathbf{R} \cdot \mathbf{B})
\end{aligned}$$

而正则角动量的对易关系依旧是

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

计算机械角动量 的期望值随时间的变化.

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} \langle \rangle &= \langle [H][H] \rangle \\
[XV_y - YV_x, H] &= \frac{i\hbar}{m}(XF_y - YF_x) + i\hbar[V_x, V_y] \\
[V_y X - V_x Y, H] &= \frac{i\hbar}{m}(F_y X - F_x Y) - i\hbar[V_x, V_y]
\end{aligned}$$

注意到 $XV_y = V_y X, YV_x = V_x Y$, 以上两式相加再除以 2, 有

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle \Lambda_z \rangle &= \frac{1}{2} \langle XF_y - YF_x - F_x Y + F_y X | XF_y - YF_x - F_x Y + F_y X \rangle \\
\frac{d}{dt} \langle \mathbf{A} \rangle &= \frac{1}{2} \langle \mathbf{R} \times \mathbf{F} - \mathbf{F} \times \mathbf{R} \rangle
\end{aligned}$$

可类比于经典结论: 角动量的变化率对于力矩.

空间位置表象中的 Hamilton 量

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^2 + q\phi \\
H &= \frac{1}{2m} [P^2 - q(\mathbf{P} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{P}) + q^2 A^2] + q\phi \\
\mathbf{P} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} &= -i\hbar\nabla \cdot \mathbf{A} \\
H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{i\hbar q}{m}\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{i\hbar q}{2m}\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{q^2}{2m}A^2 + q\phi
\end{aligned} \tag{4}$$

通常选择 Coulomb 规范

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0. \tag{5}$$

规范变换

如下形式的势的变换不会改变场强,

$$\mathbf{A} \longrightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi$$

$$\phi \longrightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial\chi}{\partial t},$$

对于 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^2 \Psi + q\phi\Psi \tag{6}$$

势的变换不能保证方程的形式不变, 还需要对量子态进行变换, 需满足 $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\Psi'(\mathbf{r}, t)|^2$,

$$\Psi \longrightarrow \Psi' = \Psi \exp \left\{ \frac{iq}{\hbar} \chi \right\} \quad (7)$$

于是 Schrödinger 方程的形式保持不变,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A}')^2 \Psi' + q\phi' \Psi'$$

规范不变量

- 速度的期望值是规范不变的.
- 速度的本征值也是规范不变的.
- 几率流密度矢量是规范不变的.

速度的期望值

$$\langle \Psi | \mathbf{V} | \Psi \rangle = \left\langle \Psi \left| \left(\frac{\mathbf{P}}{m} - \frac{q\mathbf{A}}{m} \right) \right| \Psi \right\rangle$$

在规范变换下,

$$\begin{aligned} & (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A}') \Psi' \\ &= [-i\hbar \nabla - q(\mathbf{A} + \nabla \chi)] e^{i(q/\hbar)\chi} \Psi \\ &= e^{i(q/\hbar)\chi} (-i\hbar \nabla - q\mathbf{A}) \Psi \end{aligned}$$

所以, 速度的期望值是规范不变的.

但是, 动量的期望值 $\langle \Psi | \mathbf{P} | \Psi \rangle$ 却不是规范不变的.

另外, 速度的本征值也是规范不变的. 设 $\psi(\mathbf{r})$ 是 V_z 的本征态.

$$\begin{aligned} & \left(\frac{P_z}{m} - \frac{q}{m} A_z \right) \psi(\mathbf{r}) = v_z \psi(\mathbf{r}) \\ & \left(\frac{P_z}{m} - \frac{q}{m} A'_z \right) e^{i(q/\hbar)\chi} \psi(\mathbf{r}) = e^{i(q/\hbar)\chi} \left(\frac{P_z}{m} - \frac{q}{m} A_z \right) \psi(\mathbf{r}) \\ &= v_z e^{i(q/\hbar)\chi} \psi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

几率流密度矢量

$$\mathbf{J} = \operatorname{Re} \left\{ \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{P}}{m} - \frac{q}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \right\}$$

也是规范不变的.

无自旋粒子在匀强磁场中的运动

重新回到哈密顿量 (3), 现在不考虑电场, 设电势 $\phi = 0$. 粒子质量 m , 带电量 q (以下设 $q > 0$). 磁感应强度 \mathbf{B} 恒定, 设矢量势 \mathbf{A} 不含时.

$$\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$$

$$[V_z, V_x] = [V_z, V_y] = 0$$

$$H = H_{xy} + H_z$$

$$H_{xy} = \frac{1}{2}m(V_x^2 + V_y^2), \quad H_z = \frac{1}{2}mV_z^2$$

$$[H_{xy}, H_z] = 0$$

$$[V_x, V_y] = \frac{i\hbar q}{m^2} B$$

$$\text{令 } \gamma = \sqrt{\frac{\hbar q B}{m^2}}$$

$$V_x = \gamma Q', \quad V_y = \gamma P'$$

$$[Q', P'] = i$$

$$H_{xy} = \frac{1}{2} \frac{\hbar q B}{m} (P'^2 + Q'^2)$$

$$H_{xy} \text{ 的本征值是 } (n + \frac{1}{2}) \frac{\hbar q B}{m}, n = 0, 1, 2, \dots$$

至于 H_z 的本征值, 只需考虑 V_z 的本征值. 而 V_z 的本征值是规范不变的. 可以将 A_z 选择为 0. 于是 V_z 的本征值就相当于 P_z 的本征值, 从 $-\infty$ 到 $+\infty$.

H 的本征值是

$$E_n(v_z) = (n + \frac{1}{2}) \frac{\hbar q B}{m} + \frac{1}{2} m v_z^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8)$$

被称为 Landau 能级.

讨论一下对求得的能量本征值的理解. 哈密顿量 H 由可分离的两项组成: H_{xy} 和 H_z , 它们彼此对易, 于是 H 的本征值是 H_{xy} 的本征值和 H_z 的本征值之和. 带电粒子在 z 方向的运动如同自由粒子的运动, 相应的能量即是动能 $\frac{1}{2}mv_z^2$. 横向运动, 即在平行于 xy 平面内的运动, 应该可以类比于经典情形中的圆周运动. 而经典电磁学告诉我们, 在匀强磁场 $B\mathbf{e}_z$ 中, 如果带电粒子在垂直于磁场的方向上的速度分量是 v_{xy} , 那么圆周运动的频率是 $\frac{qB}{m}$, 这正对应于 (8) 式中右端第一项中的频率.

求解本征波函数. 选择如下形式的矢量势,

$$A_x = -yB, \quad A_y = A_z = 0$$

满足 $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0, \nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$. Hamilton 量

$$H = \frac{1}{2m} [(P_x + yqB)^2 + P_y^2 + P_z^2]$$

显然 $[P_x, H] = [P_z, H] = 0$, 但是 P_y 与 H 不对易. 于是考虑对易力学量的集合 $\{H, P_x, P_z\}$.

在位置表象中,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{i\hbar q}{m} B y \frac{\partial}{\partial x} \psi + \frac{q^2 B^2}{2m} y^2 \psi = E \psi$$

ψ 可以选择为 P_x 和 P_z 的本征函数,

$$\psi(x, y, z) = \exp \{i(k_x x + k_z z)\} \varphi(y)$$

然后得到关于 $\varphi(y)$ 的方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(y)}{dy^2} + \frac{\hbar q B k_x}{m} y \varphi(y) + \left[\frac{q^2 B^2}{2m} y^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_z^2) - E \right] \varphi(y) = 0$$

y 的线性项可以通过平移变换消除.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} + \left[\frac{1}{2}m\omega_c^2(y - y_0)^2 - E' \right] \varphi(y) = 0$$

其中

$$y_0 = -\frac{\hbar k_x}{qB}$$

$$\omega_c = \frac{qB}{m}$$

$$E' = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

而 E' 可以通过谐振子的能级得到,

$$E' = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \omega = \omega_c$$

所以

$$E = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad (9)$$

本征函数的形式

$$\psi = e^{i(k_x x + k_z z)} H_n(\alpha(y - y_0)) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2(y - y_0)^2}$$

其中 $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega_c}{\hbar}} = \sqrt{\frac{qB}{\hbar}}$, H_n 是 Hermite 多项式.

轨道中心坐标 先考虑经典情形. 带电粒子的位置

$$x - x_0 = r \cos(\omega_c t + \theta), \quad y - y_0 = -r \sin(\omega_c t + \theta)$$

粒子运动的速度

$$v_x = -\omega_c r \sin(\omega_c t + \theta), \quad v_y = -\omega_c r \cos(\omega_c t + \theta)$$

所以可以说, 轨道中心的坐标是

$$x_0 = x + \frac{v_y}{\omega_c}, \quad y_0 = y - \frac{v_x}{\omega_c}$$

它们都是运动常数.

类比到量子情形, 有

$$X_0 = X + \frac{V_y}{\omega_c}, \quad Y_0 = Y - \frac{V_x}{\omega_c}$$

它们与哈密顿量对易,

$$[X_0, H] = [Y_0, H] = 0$$

所以它们也是运动常数. 但是, X_0 和 Y_0 不对易,

$$[X_0, Y_0] = \frac{-i\hbar}{qB}$$

因此, 轨道中心算子的 x 分量和 y 分量之间存在不确定关系,

$$\Delta X_0 \Delta Y_0 \geq \frac{1}{2} \frac{1}{qB}$$

选择其它形式的 \mathbf{A} , 会对结果产生怎样的影响呢?

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{2} \mathbf{R} \times \mathbf{B} = -\frac{1}{2} BY \mathbf{e}_x + \frac{1}{2} BX \mathbf{e}_y$$

速度算子

$$V_x = \frac{P_x}{m} + \frac{1}{2} \frac{qB}{m} Y = \frac{P_x}{m} + \frac{1}{2} \omega_c Y$$

$$V_y = \frac{P_y}{m} - \frac{1}{2} \frac{qB}{m} X = \frac{P_y}{m} - \frac{1}{2} \omega_c X$$

$$V_z = \frac{P_z}{m}$$

重新表示哈密顿量

$$H = H_{\perp} + H_{\parallel}$$

$$H_{\perp} = \frac{1}{2m} (P_x^2 + P_y^2) - \frac{\omega_c}{2} L_z + \frac{m\omega_c^2}{8} (X^2 + Y^2)$$

$$H_{\parallel} = \frac{1}{2m} P_z^2$$

其中 L_z 是轨道角动量 \mathbf{L} 的 z 方向上的分量. 注意到 $[H_{\perp}, H_{\parallel}] = 0$.

单独考虑 H_{\perp} , 令

$$H_{2D} = \frac{1}{2m} (P_x^2 + P_y^2) + \frac{1}{2} m \left(\frac{\omega_c}{2} \right)^2 (X^2 + Y^2)$$

这相当于一个频率为 $\frac{\omega_c}{2}$ 的二维谐振子, 而且 $[H_{2D}, L_z] = 0$. 因此 H_{2D} 和 L_z 有共同的本征态.

引入升降算子 $a_x, a_x^\dagger, a_y, a_y^\dagger$,

$$a_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\beta X + i \frac{P_x}{\hbar \beta} \right), \quad a_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\beta Y + i \frac{P_y}{\hbar \beta} \right)$$

其中

$$\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad \omega = \frac{\omega_c}{2}$$

对易关系

$$[a_x, a_x^\dagger] = [a_y, a_y^\dagger] = \mathbb{1}$$

下标不相同的对易子为零. H_{2D} 可以表示为

$$H_{2D} = (a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1) \hbar \omega$$

本征态

$$|\varphi_{n_x, n_y}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x! n_y!}} (a_x^\dagger)^{n_x} (a_y^\dagger)^{n_y} |\varphi_{0,0}\rangle$$

本征值

$$E_{2D} = (n + 1) \hbar \omega, \quad n = n_x + n_y$$

轨道角动量 L_z 可以表示为

$$L_z = i \hbar (a_x a_y^\dagger - a_y a_x^\dagger)$$

定义

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_x - i a_y), \quad a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_x + i a_y)$$

非零的对易子

$$[a_1, a_1^\dagger] = [a_2, a_2^\dagger] = \mathbb{1}$$

用 a_1 和 a_2 表示 a_x 和 a_y ,

$$a_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1 + a_2), \quad a_y = \frac{i}{\sqrt{2}}(a_1 - a_2)$$

令 $N_1 = a_1^\dagger a_1$, $N_2 = a_2^\dagger a_2$, 有

$$H_{2D} = (N_1 + N_2 + 1)\hbar\omega, \quad \omega = \frac{\omega_c}{2}$$

$$L_z = \hbar(N_1 - N_2)$$

$$H_\perp = H_{2D} - \frac{\omega_c}{2}L_z$$

算子 N_1 和 N_2 的本征值分别记作 n_1 和 n_2 , 它们的取值都是 $0, 1, 2, \dots$. 容易得到 H_\perp 的本征值

$$E_\perp = (n_1 + n_2 + 1)\frac{\hbar\omega_c}{2} - (n_1 - n_2)\frac{\hbar\omega_c}{2} = \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$$

可以看出, E_\perp 正好等于 (9) 式的第一项, 考虑了 H_\parallel 之后, 哈密顿量的本征值仍然是 (9), 这是应该的, 因为规范变换不会改变能量本征值 (对比前面说过的结论: 速度算子的本征值是规范不变的).