带电粒子在电磁场中的运动

薛定鄂方程的幺正变换

一般量子力学问题的薛定鄂方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})\right]\psi=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$$

对于库仑势来说：

$$U(\vec{r})=q\Phi(\vec{r})$$

其中 $\Phi(\vec{r})$ 为外界电场力所引起的库仑势（注意不一定是中心势），q为粒子电荷。对氢原子(中心势场)中的电子来说

$$q=-e$$

$$\Phi(\vec{r})=k_1\frac{e}{r}$$

对任意势场，对方程做幺正变换：

$$\psi \quad \rightarrow \quad \psi' = e^{i\theta}\psi$$

$$\hat{H} \quad \rightarrow \quad \hat{H}' = e^{i\theta}\hat{H}e^{-i\theta}$$

其中 $\theta = \theta(\vec{r})$ 为不显含时间的任意实函数，显然这一变换是幺正变换，也不改变薛定鄂方程：

$$\hat{H}'\psi' = e^{i\theta}\hat{H}e^{-i\theta}e^{i\theta}\psi$$

$$= e^{i\theta}\hat{H}\psi$$

$$= e^{i\theta}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$$

$$= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}e^{i\theta}\psi$$

$$= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'$$

含库仑势 $q\Phi$ 的哈密顿算符的变换为

$$\hat{H}' = e^{i\theta}\hat{H}e^{-i\theta}$$

$$= e^{i\theta}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + q\Phi\right]e^{-i\theta}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\vec{\nabla} - i\vec{\nabla}\theta\right)^2 + q\Phi$$

$$= \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} - \hbar\vec{\nabla}\theta\right)^2 + q\Phi$$

推导中用到了下面公式

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial x} e^{-i\theta} = e^{-i\theta} \dfrac{\partial}{\partial x} - i e^{-i\theta} \dfrac{\partial \theta}{\partial x} \\ e^{i\theta} \dfrac{\partial}{\partial x} = \dfrac{\partial}{\partial x} e^{i\theta} - i \dfrac{\partial \theta}{\partial x} e^{i\theta} \end{cases}$$

推导过程可以用 $\vec{\nabla}$ 的x,y,z分量分别进行-请自行练习

也就是说，哈密顿算符的幺正变换即是如下代换：

$$\hat{\vec{p}} \quad \longrightarrow \quad \hat{\vec{p}} - \hbar\vec{\nabla}\theta, \quad (\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla})$$

因为θ是任意的，所以最普遍的哈密顿算符表达式应为

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} - \hbar\vec{\nabla}\theta\right)^2 + q\Phi$$

而一般常见表达式(如氢原子)只是 $\theta = 0$ 时的特殊情况

与此哈密顿算符对应的经典哈密顿量也应具有最普遍的形式：

$$H=\frac{1}{2m}\left(\vec{p}-\vec{p}'\right)^2+q\Phi$$

其中 $\vec{p}'\equiv\hbar\vec{\nabla}\theta$ 。下面我们求与这个哈密顿量对应的经典哈密顿正则运动方程（见分析力学）：

$$\begin{cases}\dot{\vec{r}}=\vec{\nabla}_p H\\ \dot{\vec{p}}=-\vec{\nabla}H\end{cases}$$

即

$$\begin{cases}\dot{\vec{r}}=\dfrac{1}{m}\left(\vec{p}-\vec{p}'\right) & (1)\\ \dot{p}_i=\dfrac{1}{m}\left(\vec{p}-\vec{p}'\right)\cdot\dfrac{\partial\vec{p}'}{\partial x_i}-q\dfrac{\partial\Phi}{\partial x_i} & (2)\end{cases}$$

由方程(1)得：

$$\vec{p} = m\dot{\vec{r}} + \vec{p}' = m\vec{v} + \vec{p}'$$

其中 $\vec{p}$ 应理解为广义动量，它并不等于机械动量 $m\vec{v}$。再求时间的倒数得

$$\dot{p}_i = m\dot{v}_i + \dot{p}'_i$$

$$= F_i + (\vec{v}\cdot\vec{\nabla})p'_i$$

再与方程(2)相结合得

$$F_i + (\vec{v}\cdot\vec{\nabla})p'_i = \boxed{\frac{1}{m}(\vec{p} - \vec{p}')} \cdot \frac{\partial \vec{p}'}{\partial x_i} - q\frac{\partial \Phi}{\partial x_i}$$

即：

$$F_i = -(\vec{v}\cdot\vec{\nabla})p'_i + \boxed{\vec{v}} \cdot \frac{\partial \vec{p}'}{\partial x_i} - q\frac{\partial \Phi}{\partial x_i}$$

$$F_i = -(\vec{v}\cdot\vec{\nabla})p'_i + \vec{v}\cdot\frac{\partial\vec{p}'}{\partial x_i} - q\frac{\partial\Phi}{\partial x_i}$$

$$= \sum_j v_j\left(\frac{\partial p'_j}{\partial x_i} - \frac{\partial p'_i}{\partial x_j}\right) - q\frac{\partial\Phi}{\partial x_i}$$

$$= \left[\vec{v}\times(\vec{\nabla}\times\vec{p}')\right]_i + qE_i$$

即：

$$\vec{F}=\vec{v}\times(\vec{\nabla}\times\vec{p}')+q\vec{E}$$

联想电磁学中电荷q所受的外场洛仑兹力表达式：

$$\vec{F}=q\vec{v}\times\vec{B}+q\vec{E}$$

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

可见

$$\vec{p}'=q\vec{A}$$ （$\vec{A}$ 为磁矢势）

$\vec{p}$ ：广义动量

$\vec{p}-q\vec{A}$ ：机械动量

那么现在哈密顿量表达式就是

$$H=\frac{1}{2m}\left(\vec{p}-q\vec{A}\right)^2+q\Phi$$

其对应的哈密顿算符为

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}}-q\vec{A}\right)^2+q\Phi$$

在幺正变换 $e^{i\theta}\hat{H}e^{-i\theta}$ 下，相当于做了如下代换（练习）

$$\hat{\vec{p}}-q\vec{A}\quad\longrightarrow\quad\hat{\vec{p}}\text{-}q\left(\vec{A}+\frac{\hbar}{q}\vec{\nabla}\theta\right)$$

或：

$$\vec{A}\quad\longrightarrow\quad\vec{A}+\frac{\hbar}{q}\vec{\nabla}\theta$$

根据幺正变换的性质，在量子力学中，这一代换不会引起任何物理上的变化。在经典力学中呢？

$$\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}=\vec{\nabla}\times\left(\vec{A}+\frac{\hbar}{q}\vec{\nabla}\theta\right)$$ （梯度无旋）

也就是说，这一代换在经典电磁学中同样不会产生任何物理上的不同

以上考虑的是静电场和静磁场的情况，在变化的电磁场中，哈密顿量显含时间，相应的幺正变换(练习)则为

$$\begin{cases}\psi \longrightarrow \psi'=e^{i\theta}\psi \\ \vec{A} \longrightarrow \vec{A}'=\vec{A}+\frac{\hbar}{q}\vec{\nabla}\theta \\ \Phi \longrightarrow \Phi'=\Phi-\frac{\hbar}{q}\frac{\partial}{\partial t}\theta\end{cases}$$

$$\boxed{\text{注意此时}\ \theta=\theta(\vec{r},t)}$$

这一套变换又称为规范（gauge）变换。规范变换不改变系统物理学性质-系统具有规范不变性

讨论-带电粒子在外电磁场作用下的哈密顿算符：

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}}-q\vec{A}\right)^2+q\Phi$$

同氢原子问题（只有 $q\Phi$ 项）一样，这个算符对应薛定鄂方程的适用范围是**低速运动的粒子**。对于高能问题，需对波函数和电磁场进行量子化（所谓二次量子化）

在经典情况下的哈密顿量也好理解:

$$H=\frac{1}{2m}\left(\vec{p}-q\vec{A}\right)^2+q\Phi$$

磁力不是保守力，不像库仑力那样有一个标量势能项。但是我们知道电磁场是包含动量的，电荷q产生的 $\vec{E}$ 与外磁场 $\vec{B}$ 结合产生动量密度 $\left(\vec{E}\times\vec{B}\right)/\mu_0$，这反映在动量的改变量 $q\vec{A}$ 中。$\vec{p}$ 为正则动量，$\vec{p}-q\vec{A}$ 为机械动量

真空中传播的电磁波的能量密度为

$$E=\frac{1}{2}\left(\varepsilon_0 E^2+\frac{1}{\mu_0}B^2\right)$$

其中电场能与磁场能各占一半，所以

$$\varepsilon_0 E^2=\frac{1}{\mu_0}B^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{B}{E}=\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}=\frac{1}{c}$$

结合洛仑兹力公式

$$\vec{F}=q\vec{v}\times\vec{B}+q\vec{E}$$

粒子所受磁场力与电场力的比值为

$$\frac{vB}{E}=\frac{v}{c}<<1$$

所以说对低速粒子来说，其所感受到的电磁波中的磁场力远小于电场力，磁力可以忽略不计

要想提高磁力的量子效应，就必须

1）施加强磁场
2）粒子速度与磁感应线垂直
3）磁感应强度B远大于电场强度E
4）粒子运动速度不能过低

前沿介绍：规范不变性与Yang-Mills理论

在量子场论中，初等量子力学中的波函数演变为经典场进入到哈密顿量中，与经典电磁场一起进行二次量子化

在这种情况下，规范变换就不像初等量子力学那样对波函数和算符同时变换，而是仅对哈密顿量（或拉格朗日量）进行变换-这就体现为系统的一种**对称不变性**

根据Noether定理，每一种对称性的背后都有一个守恒量。在量子场论中，如果系统规范不变，将带来深刻的物理结果：

1）系统电荷守恒（诸如$e \to \nu\gamma$不可能发生）
2）光子质量为0
3）光子自旋投影只能是$\pm\hbar$，没有0分量

前沿介绍：规范不变性与Yang-Mills理论

规范不变对系统的拉格郎日形式做出了强烈的限制，基于规范不变思想的量子场论最早由Pauli提出（1953），可惜没有正式发表

Yang、Mills二人发展了这一思想，把规范不变的公设从电磁SU(1)相互作用延伸到了SU(N)相互作用，对SU(N)相互作用的形式作出了限定。美中不足的是，规范不变性成立的前提是所有基本粒子质量为0，这显然与实验不符，这也是Pauli没有发表他早期研究的原因

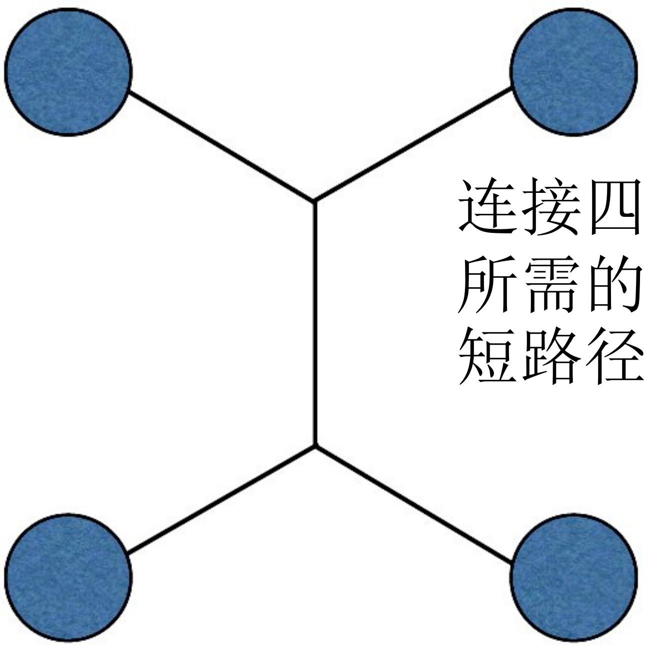
物理的车轮继续前行，后来希格斯等提出了基于自发性对称破缺的机制来解释为什么粒子质量不为0。2012年希格斯粒子的发现，使得基于**规范不变**和**希格斯质量机制**这两大支柱的粒子物理“**标准模型**”得以最终确立

前沿介绍：规范不变性与Yang-Mills理论

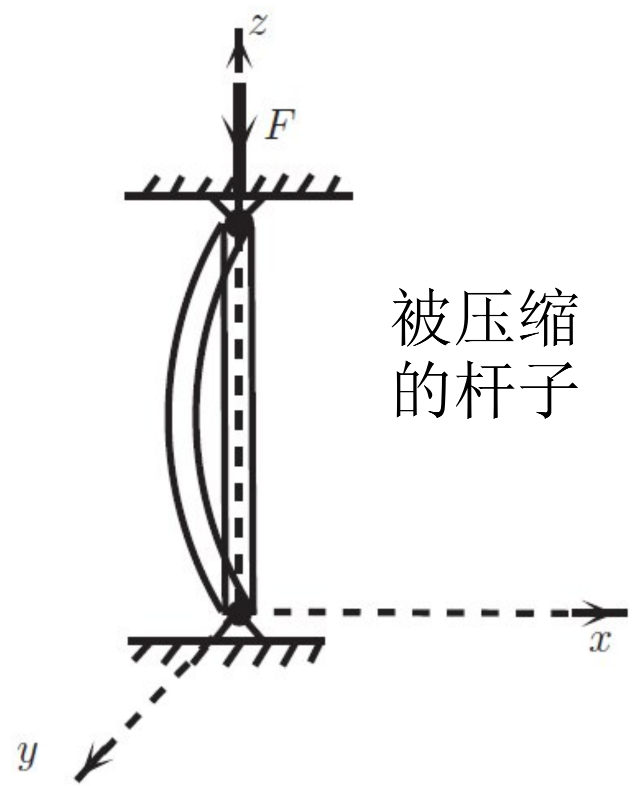
杨振宁和米尔斯

前沿介绍：自发性对称破缺机制

自发性对称破缺机制：具有较高对称性系统的基态解具有较低对称性



连接四点所需的最短路径



被压缩的杆子

附件

库仑规范与洛仑兹规范

根据电磁势 $\Phi, \vec{A}$ 与场强 $\vec{E}, \vec{B}$ 的关系(参阅电动力学)：

$$\begin{cases} \vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi - \dfrac{\partial}{\partial t}\vec{A} \\ \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \end{cases}$$

可以看到在经典电动力学中，规范变换也不引起任何物理上的不同。这组电磁矢的定义可代替麦克斯维方程组中的两个无源方程：

$$\begin{cases} \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \\ \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\dfrac{\partial \vec{B}}{\partial t} \end{cases}$$

（旋度无散）

另外两个有源方程：

$$\begin{cases} \vec{\nabla}\cdot\vec{E} = \dfrac{\rho}{\varepsilon_0} \\ \vec{\nabla}\times\vec{B} = \mu_0\vec{J} + \mu_0\varepsilon_0\dfrac{\partial\vec{E}}{\partial t} \end{cases}$$

就变为：

$$\begin{cases} -\nabla^2\Phi - \dfrac{\partial}{\partial t}(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}) = \dfrac{\rho}{\varepsilon_0} \\ -\nabla^2\vec{A} + \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2\vec{A}}{\partial t^2} + \vec{\nabla}\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{A} + \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial\Phi}{\partial t}\right) = \mu_0\vec{J} \end{cases}$$

利用系统的规范不变性，可根据需要定立规范以简化问题。如处理静态电磁场问题时，可使用库仑规范 $\vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0$，而在处理变化电磁场问题时，可使用洛仑兹规范：

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\Phi}{\partial t} = 0$$