原子与光场相互作用理论中的最小耦合哈密顿量

DeepSeek

April 12, 2025

1 引言

在量子光学和原子物理中，带电粒子（如电子）与电磁场的相互作用是核心研究课题之一。描述这种相互作用的标准方法是通过最小耦合（minimal coupling）哈密顿量，其形式为：

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)\right]^2 + eU(\boldsymbol{r}, t) + V(\boldsymbol{r}) \tag{1.1}$$

本文将系统推导该哈密顿量的起源，分析其数学结构，并讨论其物理意义。

2 经典电动力学基础

2.1 电磁势与规范不变性

电磁场由矢势 $\boldsymbol{A}$ 和标势 U 描述，满足：

$$\boldsymbol{E} = -\nabla U - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \tag{2.1}$$

$$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A} \tag{2.2}$$

规范变换保持物理场不变：

$$\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A} + \nabla\chi \tag{2.3}$$

$$U \to U - \frac{\partial \chi}{\partial t} \tag{2.4}$$

其中 $\chi(\boldsymbol{r}, t)$ 为任意标量函数。

2.2 带电粒子的经典运动方程

带电粒子在电磁场中的洛伦兹力方程为：

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} = e\left(\boldsymbol{E} + \dot{\boldsymbol{r}} \times \boldsymbol{B}\right) \tag{2.5}$$

对应的拉格朗日量为：

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{r}}^2 + e\dot{\boldsymbol{r}} \cdot \boldsymbol{A} - eU \tag{2.6}$$

3 量子化过程

3.1 正则动量与哈密顿量

正则动量定义为：

$$\boldsymbol{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}} = m\dot{\boldsymbol{r}} + e\boldsymbol{A} \tag{3.1}$$

通过 Legendre 变换得到经典哈密顿量：

$$\begin{aligned} H &= \boldsymbol{p} \cdot \dot{\boldsymbol{r}} - L && (3.2) \\ &= \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 + eU && (3.3) \end{aligned}$$

3.2 量子化规则

将经典变量替换为算符，满足对易关系：

$$[r_i, p_j] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ij} \tag{3.4}$$

由此得到量子哈密顿量：

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)\right)^2 + eU(\boldsymbol{r}, t) + V(\boldsymbol{r}) \tag{3.5}$$

其中 $V(\boldsymbol{r})$ 为静态势能（如原子核的库仑势）。

4 哈密顿量的展开与解释

展开平方项：

$$(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 = \boldsymbol{p}^2 - e(\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{A} + \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{p}) + e^2\boldsymbol{A}^2 \tag{4.1}$$

注意 $\boldsymbol{p}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 不对易，需保持算符顺序。利用：

$$\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{p} - \mathrm{i}\hbar(\nabla \cdot \boldsymbol{A}) \tag{4.2}$$

在库仑规范（$\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0$）下简化为：

$$\mathcal{H} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{e}{m}\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{p} + \frac{e^2}{2m}\boldsymbol{A}^2 + eU + V \tag{4.3}$$

4.1 各项的物理意义

- 第一项：自由粒子动能
- 第二项：$\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{A}$ 相互作用项（线性耦合）
- 第三项：$\boldsymbol{A}^2$ 项（非线性耦合）
- 第四项：标势能
- 第五项：静态势能

5　规范选择与偶极近似

5.1　偶极近似

当光场波长远大于原子尺寸时，可取：

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) \approx \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_0,t) \tag{5.1}$$

其中 $\boldsymbol{r}_0$ 为原子质心位置。此时哈密顿量简化为：

$$\mathcal{H} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) - \frac{e}{m}\boldsymbol{A}(t)\cdot\boldsymbol{p} + \frac{e^2}{2m}\boldsymbol{A}^2(t) \tag{5.2}$$

5.2　长度规范变换

通过规范变换 $\chi = -\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{A}(t)$，可得偶极相互作用项：

$$\mathcal{H}_{\text{dipole}} = -e\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{E}(t) \tag{5.3}$$

这建立了两种等效的相互作用绘景。

6　相互作用绘景下的表达式

将哈密顿量分解为：

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}} \tag{6.1}$$

其中：

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) \tag{6.2}$$

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = -\frac{e}{m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p} + \frac{e^2}{2m}\boldsymbol{A}^2 \tag{6.3}$$

在量子光学中，常将矢量势量子化：

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \sum_{\boldsymbol{k},\lambda}\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k V}}\left(a_{\boldsymbol{k},\lambda}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \text{h.c.}\right)\boldsymbol{\epsilon}_{\boldsymbol{k},\lambda} \tag{6.4}$$

由此可得光场与原子的具体耦合形式。

7　结论

最小耦合哈密顿量完整描述了带电粒子与电磁场的相互作用，其形式由规范不变性原理决定。通过不同的规范选择和近似方案，可推导出适用于不同物理情景的相互作用模型，为研究原子-光场相互作用提供了基础理论框架。