第六章、磁场中带电粒子的运动

\$ 6.1 带电粒子在电磁场中的 Schrödinger 方程

假定外磁场是恒定的,即 $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_B$,且均匀。则一个带电粒子在其中运动的 Schrödinger 方程是可解的。

首先,让我们用正则量子化规则来推导这一方程。从经典电动力学我们知道,一个带电粒子在电磁场中满足牛顿方程

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = \frac{q}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B} + q\mathbf{E}.$$
 (1)

我们现在要找到相应的拉格朗日量 L, 使得方程 (1) 可以从 Lagrange 方程

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \right) - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} = 0 \tag{2}$$

推出。为此,我们引入矢势和标势

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \varphi. \tag{3}$$

依赖于 A 和 φ , 我们有

$$L = \frac{mv^2}{2} + \frac{q}{c}\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} - q\varphi. \tag{4}$$

事实上,对于 v 求导后,我们有

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = m\mathbf{v} + \frac{q}{c}\mathbf{A}.\tag{5}$$

而将L对于r求导给出

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} = \nabla L = \frac{q}{c} \nabla (\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}) - q \nabla \varphi. \tag{6}$$

利用矢量公式

$$\nabla(\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}) = (\mathbf{A} \cdot \nabla)\mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{A} + \mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{v}) + \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A})$$
(7)

及

$$(\mathbf{A} \cdot \nabla)\mathbf{v} = 0, \quad \nabla \times \mathbf{v} = 0, \tag{8}$$

我们得到

$$\nabla(\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}) = (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{A} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}. \tag{9}$$

代入 Langrange 方程后, 我们有

$$\frac{d}{dt}(m\mathbf{v} + \frac{q}{c}\mathbf{A}) = m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} + \frac{q}{c}\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{q}{c}(\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{A} + \frac{q}{c}\mathbf{v}\times\mathbf{B} - q\nabla\varphi. \tag{10}$$

另一方面, 粒子所感受到的 A 随时间的变化又可写为

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial y}\frac{dy}{dt} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial z}\frac{dz}{dt} = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{A}.$$
 (11)

代入方程 (10) 的左边后, 我们有

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} + \frac{q}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} + \frac{q}{c}(\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{A} = \frac{q}{c}\mathbf{v}\times\mathbf{B} - q\nabla\varphi + \frac{q}{c}(\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{A},\tag{12}$$

或是

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = \frac{q}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B} + q\left(-\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla\varphi\right) = \frac{q}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B} + q\mathbf{E}.$$
 (13)

由此, 我们得出结论, L即是所要求的拉氏量。

下面, 我们要求正则动量。它由下式给出。

$$\mathbf{P} \equiv \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m\mathbf{v} + \frac{q}{c}\mathbf{A}.$$
 (14)

将之代入哈密顿量的表达式后, 我们得到

$$H = \mathbf{P} \cdot \mathbf{v} - L = \left(m\mathbf{v} + \frac{q}{c}\mathbf{A} \right) \cdot \mathbf{v} - \left(\frac{mv^2}{2} + \frac{q}{c}\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} - q\varphi \right)$$
$$= \frac{mv^2}{2} + q\varphi = \frac{1}{2m} \left(m\mathbf{v} \right)^2 + q\varphi = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} - \frac{q}{c}\mathbf{A} \right)^2 + q\varphi. \tag{15}$$

最后一步是量子化。我们要求

$$\left[\hat{x}, \, \hat{P}_x\right] = \left[\hat{y}, \, \hat{P}_y\right] = \left[\hat{z}, \, \hat{P}_z\right] = i\hbar. \tag{16}$$

这等价于要求

$$\hat{\mathbf{P}} = \frac{\hbar}{i} \nabla. \tag{17}$$

因此, 我们最后得到 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + q\varphi(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t).$$
 (18)

与这一方程相联系的一些概念,如电流密度和规范不变性等问题,请阅读教科书 245 至 248 页。

§6.2 正常 Zeeman 效应

我们考虑的第一个例子,是氢原子光谱在强磁场下的分裂现象。此时,我 们有

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}, \quad q\varphi(\mathbf{r}) = V(r). \tag{19}$$

代入定态的 Schrödinger 方程后, 我们有

$$E\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \left(\hat{P}_x - \frac{eB}{2c} y \right)^2 \Psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2m} \left(\hat{P}_y + \frac{eB}{2c} x \right)^2 \Psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2m} \hat{P}_z^2 \Psi(\mathbf{r}) + V(r) \Psi(\mathbf{r}).$$
(20)

这里, 我们用到了 q = -e 这一事实。将两个平方项展开后, 我们有

$$E\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m}\hat{P}^2\Psi(\mathbf{r}) + V(r)\Psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2m}\frac{eB}{c}\hat{L}_z\Psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2m}\frac{e^2B^2}{4c^2}\left(x^2 + y^2\right)\Psi(\mathbf{r}). \tag{21}$$

不难看出,波函数 (在略去 $x^2 + y^2$ 项后)

$$\Psi_{n_r LM}(r, \theta, \varphi) = R_{n_r L}(r) Y_{LM}(\theta, \varphi). \tag{22}$$

仍是这一方程的本征函数。代入后, 我们得到

$$E\Psi_{n_rLM}(r, \theta, \varphi) = \left(E_{n_rL} + \frac{eB\hbar}{2mc}M\right)\Psi_{n_rLM}(r, \theta, \varphi). \tag{23}$$

因此,原来简并的能级 E_{nrL} 现在分裂成 2L+1 条 $(-L \le M \le L)$ 。分裂后的相邻能级间距为 $\hbar\omega_L = \frac{eB\hbar}{2mc}$ 。而 $\omega_L = \frac{eB}{2mc}$ 称为 Larmor 频率。显然, $\omega_L \propto B$ 。由于能级分裂,相应的光谱线也发生分裂,如教科书 253 页上的图 7.2 所示。 钠黄线 $(\lambda \sim 5893 \text{Å})$ 在磁场中分裂成三条, $\omega, \omega + \omega_L$ 和 $\omega - \omega_L$ 。并且外场越强,分裂就越大。

§6.3 Landau 能级

现在,我们考虑另外一个例子。即外磁场中的自由电子运动。在此情况下, 我们有

$$\varphi(\mathbf{r}) = 0, \quad \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}.$$
 (24)

代入 Schödinger 方程后, 我们有

$$E\Psi(\mathbf{r}) = \left[\frac{1}{2m}\left(\hat{P}_x - \frac{eB}{2c}y\right)^2 + \frac{1}{2m}\left(\hat{P}_y + \frac{eB}{2c}x\right)^2 + \frac{1}{2m}\hat{P}_z^2\right]\Psi(\mathbf{r})$$
$$= \frac{1}{2m}\hat{P}^2\Psi(\mathbf{r}) + \frac{e^2B^2}{8mc^2}\left(x^2 + y^2\right)\Psi(\mathbf{r}) + \frac{eB}{2mc}\hat{L}_z\Psi(\mathbf{r}). \tag{25}$$

有趣的是,这一方程可以精确求解。为此,我们引入柱坐标 (ρ, φ, z) 。在此坐标下,我们有

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \hat{P}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right). \tag{26}$$

代入后, 我们有

$$E\Psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(\mathbf{r}) + \frac{eB\hbar}{2mci} \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi(\mathbf{r}) + \frac{e^2 B^2}{8mc^2} \rho^2 \Psi(\mathbf{r}). \quad (27)$$

令

$$\Psi(\mathbf{r}) = R(\rho)e^{in\varphi}e^{ikz}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$
(28)

则我们有

$$ER(\rho) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{n^2}{\rho^2} - k^2 \right) R(\rho) + \frac{eB\hbar}{2mc} nR(\rho) + \frac{e^2 B^2}{8mc^2} \rho^2 R(\rho), \tag{29}$$

或是

$$\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{eB\hbar}{2mc}n\right)R(\rho) \equiv \tilde{E}R(\rho)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2R(\rho)}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{dR(\rho)}{d\rho}\right) + \frac{n^2\hbar^2}{2m}\frac{1}{\rho^2}R(\rho) + \frac{e^2B^2}{8mc^2}\rho^2R(\rho). \tag{30}$$

这个方程有两个极点 $\rho=0$ 和 $\rho=\infty$ 。 我们需要分别加以考虑。

(1) 当 $\rho \to \infty$ 时, 我们有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2R(\rho)}{d\rho^2} + \frac{e^2B^2}{8mc^2}\rho^2R(\rho) \cong 0,$$
(31)

或是

$$\frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} - \frac{e^2 B^2}{4\hbar^2 c^2} \rho^2 R(\rho) \cong 0.$$
 (32)

其近似解为

$$R^{(1)}(\rho) = \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{eB}{2\hbar c}\rho^2\right) \equiv \exp\left(-\frac{m\omega_L}{2\hbar}\rho^2\right). \tag{33}$$

这里, $\omega_L = \frac{eB}{2mc}$.

(2) 当 $\rho \rightarrow 0$ 时, 我们近似有

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR(\rho)}{d\rho} \right) + \frac{n^2 \hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho^2} R(\rho) \cong 0.$$
 (34)

$$-[s(s-1)+s] + n^2 = 0. (35)$$

即 $s = \pm n$ 。 我们取 $R^{(a)}(\rho) = \rho^{|n|}$ 。 令

$$R(\rho) = \rho^{|n|} \exp\left(-\frac{m\omega_L}{2\hbar}\rho^2\right) \chi(\rho). \tag{36}$$

则我们有

$$R'(\rho) = |n|\rho^{|n|-1} \exp\left(-\frac{m\omega_L}{2\hbar}\rho^2\right) \chi(\rho) + \rho^{|n|} \exp\left(-\frac{m\omega_L}{2\hbar}\rho^2\right) \chi'(\rho)$$

$$+ \rho^{|n|+1} \left(-\frac{m\omega_L}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{m\omega_L}{2\hbar}\rho^2\right) \chi(\rho)$$

$$R''(\rho) = |n|(|n|-1)\rho^{|n|-2} \exp\left(-\frac{m\omega_L}{2\hbar}\rho^2\right) \chi(\rho) + 2|n|\rho^{|n|-1} \exp\left(-\frac{m\omega_L}{2\hbar}\rho^2\right) \chi'(\rho)$$

$$+ |n|\rho^{|n|} \left(-\frac{m\omega_L}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{m\omega_L}{2\hbar}\rho^2\right) \chi(\rho) + \rho^{|n|} \exp\left(-\frac{m\omega_L}{2\hbar}\rho^2\right) \chi''(\rho)$$

$$+ 2\rho^{|n|+1} \left(-\frac{m\omega_L}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{m\omega_L}{2\hbar}\rho^2\right) \chi'(\rho)$$

$$+ (|n|+1)\rho^{|n|} \left(-\frac{m\omega_L}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{m\omega_L}{2\hbar}\rho^2\right) \chi(\rho)$$

$$+ \rho^{|n|+2} \frac{m^2\omega_L^2}{\hbar^2} \exp\left(-\frac{m\omega_L}{2\hbar}\rho^2\right) \chi(\rho). \tag{37}$$

代入方程后, 我们有

$$-\frac{2m}{\hbar^{2}}\tilde{E}\rho^{|n|}\chi(\rho) = |n|(|n|-1)\rho^{|n|-2}\chi(\rho) + 2|n|\rho^{|n|-1}\chi'(\rho)$$

$$- (2|n|+1)\rho^{|n|}\frac{m\omega_{L}}{\hbar}\chi(\rho) + \rho^{|n|}\chi''(\rho) - \frac{2m\omega_{L}}{\hbar}\rho^{|n|+1}\chi'(\rho)$$

$$+ \rho^{|n|+2}\frac{m^{2}\omega_{L}^{2}}{\hbar^{2}}\chi(\rho) + |n|\rho^{|n-2|}\chi(\rho) + \rho^{|n-1|}\chi'(\rho)$$

$$- \frac{m\omega_{L}}{\hbar}\rho^{|n|}\chi(\rho) - \frac{n^{2}}{\rho^{2}}\rho^{|n|}\chi(\rho) - \frac{m^{2}\omega_{L}^{2}}{\hbar^{2}}\rho^{|n|+2}\chi(\rho)$$

$$= \rho^{|n|}\chi''(\rho) + (2|n|\rho^{|n|-1} - \frac{2m\omega_{L}}{\hbar}\rho^{|n|+1} + \rho^{|n|-1})\chi'(\rho)$$

$$- (2|n|+2)\rho^{|n|}\frac{m\omega_{L}}{\hbar}\chi(\rho), \tag{38}$$

或是

$$\rho^{|n|}\chi''(\rho) + \left[(2|n|+1)\rho^{|n|-1} - \frac{2m\omega_L}{\hbar}\rho^{|n|+1} \right]\chi'(\rho)$$

$$- \left[(2|n|+2)\frac{m\omega_L}{\hbar}\rho^{|n|} - \frac{2m}{\hbar^2}\tilde{E}\rho^{|n|} \right]\chi(\rho) = 0.$$
(39)

方程两边同除 $\rho^{|n|}$ 后, 我们有

$$0 = \chi''(\rho) + \frac{1}{\rho} \left[(2|n|+1) - \frac{2m\omega_L}{\hbar} \rho^2 \right] \chi'(\rho) - \left[(2|n|+2) \frac{m\omega_L}{\hbar} - \frac{2m}{\hbar} \tilde{E} \right] \chi(\rho). \tag{40}$$

若令 $\frac{m\omega_L}{\hbar}\rho^2 = \xi$, 则我们有

$$\frac{d\chi}{d\rho} = \frac{d\xi}{d\rho} \frac{d\chi}{d\xi} = \frac{2m\omega_L}{\hbar} \rho \frac{d\chi}{d\xi}$$

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2} = \frac{d}{d\rho} \left(\frac{2m\omega_L}{\hbar} \rho \frac{d\chi}{d\xi}\right) = \frac{2m\omega_L}{\hbar} \frac{d\chi}{d\xi} + \frac{4m^2\omega_L^2}{\hbar^2} \rho^2 \frac{d^2\chi}{d\xi^2}$$

$$= \frac{2m\omega_L}{\hbar} \frac{d\chi}{d\xi} + \frac{4m\omega_L}{\hbar} \xi \frac{d^2\chi}{d\xi^2}.$$
(41)

代入方程后, 我们有

$$\frac{4m\omega_L}{\hbar}\xi\frac{d^2\chi}{d\xi^2} + \frac{2m\omega_L}{\hbar}\frac{d\chi}{d\xi} + \frac{2m\omega_L}{\hbar}\left[(2|n|+1) - 2\xi\right]\frac{d\chi}{d\xi} - \left[(2|n|+2)\frac{m\omega_L}{\hbar} - \frac{2m}{\hbar^2}\tilde{E}\right]\chi$$

$$= \frac{4m\omega_L}{\hbar}\xi\frac{d^2\chi}{d\xi^2} + \frac{2m\omega_L}{\hbar}\left[(2|n|+2) - 2\xi\right]\frac{d\chi}{d\xi} - \left[(2|n|+2)\frac{m\omega_L}{\hbar} - \frac{2m}{\hbar^2}\tilde{E}\right]\chi$$

$$= 0. \tag{42}$$

两边同除 4mwL 后, 我们有

$$\xi \frac{d^2 \chi}{d\xi^2} + \left[(|n| + 1) - \xi \right] \frac{d\chi}{d\xi} - \left[\frac{|n| + 1}{2} - \frac{\tilde{E}}{2\hbar\omega_L} \right] \chi = 0. \tag{43}$$

将此方程与合流超几何方程

$$\xi \frac{d^2 \chi}{d\xi^2} + (\gamma - \xi) \frac{d\chi}{d\xi} - \alpha \chi = 0 \tag{44}$$

相比较后, 我们有

$$\alpha = \frac{|n|+1}{2} - \frac{\tilde{E}}{2\hbar\omega_L}, \quad \gamma = |n|+1. \tag{45}$$

当 $\xi \sim \rho^2 \to \infty$ 时,有限的解由截断

$$\frac{|n|+1}{2} - \frac{\tilde{E}}{2\hbar\omega_L} = \alpha = -n_\rho, \quad n_\rho = 0, \ 1, \ 2, \dots$$
 (46)

给出。由此我们得到

$$\tilde{E} = E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{eB\hbar}{2mc} n = E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - n\hbar\omega_L = (2n_\rho + |n| + 1)\hbar\omega_L. \tag{47}$$

因此, 我们最后得到

$$E = (2n_{\rho} + |n| + n + 1)\hbar\omega_L + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$
 (48)

这就是我们要求的本征值, 而相应的本征函数则为

$$\psi_{n_{\rho}, n}(\rho, \varphi, z) \cong \rho^{|n|} F(-n_{\rho}, |n| + 1, \frac{m\omega_L}{\hbar} \rho^2) e^{-\frac{m\omega_L}{2\hbar} \rho^2} e^{in\varphi} e^{ikz}. \tag{49}$$

这些能级称为 Landau 能级。由于n 可以取负值,因此每一条 Landau 能级

$$E_{N} = (N+1)\hbar\omega_{L} + \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m}$$

$$= (2n_{\rho} + |n| + n + 1)\hbar\omega_{L} + \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m}$$
(50)

都是无穷维简并的。这一点非常重要。

另一方面,由于磁场强度 $\mathbf{B} = B\mathbf{k}$ 也可以由矢势 $\mathbf{A} = -By\mathbf{i}$ 给出,带电粒子的定态 Schrödinger 方程具有另外一个规范等价的形式

$$E\Psi(\mathbf{r}) = \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{P}_x - \frac{eB}{c} y \right)^2 + \frac{1}{2m} \hat{P}_y^2 + \frac{1}{2m} \hat{P}_z^2 \right] \Psi(\mathbf{r}). \tag{51}$$

我们取

$$\Psi(x, y, z) = e^{ik_z z} e^{ik_x x} \phi(y). \tag{52}$$

代入后, 我们有

$$E\phi(y) = \left[\frac{1}{2m} \left(\hbar k_x - \frac{eB}{c}y\right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\right] \phi(y).$$
 (53)

经过整理后, 我们得到

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(y)}{dy^2} + \frac{1}{2}m\omega_c^2(y - y_0)^2\phi(y) = \left(E - \frac{\hbar^2k_z^2}{2m}\right)\phi(y). \tag{54}$$

这里

$$\omega_c = \frac{eB}{mc} = 2\omega_L, \quad y_0 = \frac{c\hbar k_x}{eB}.$$
 (55)

这是一个一维谐振子方程。它的解可以写作

$$\phi_{y_0 n}(y) \sim e^{-\frac{m\omega_c}{2\hbar}(y-y_0)^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega_c}{\hbar}}(y-y_0)\right). \tag{56}$$

而其能量则为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = (2n+1)\hbar\omega_L + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$
 (57)

从表面上看,这一能级是非简并的。但由于 $y_0 = \frac{chk_x}{eB}$ 随 k_x 的变化可以取任意值,因此这一能级也是无穷维简并的。

练习: (1) 教科书 262 页上第 7.3 题。

(2) 习题集 7.1, 7.2, 7.4, 7.5。