22 级量子力学 a 期中串讲

李梓瑞

核科学与技术系, 北京航空航天大学物理学院

2024 年 11 月 2 日

1 量子力学的物理结构

1.1 数学工具

在彻底建立量子力学之前, 我们已经通过一些现象窥见量子化的一角, 比如我们在原子物理中已经学过的波粒二象性、德布罗意关系、薛定谔方程、海森堡不确定度关系等. 通过量子力学, 我们会建立一套更自洽的理论以便更彻底地微观世界的现象. 本节将介绍所需的数学工具.

在原子物理中我们已经接触过波函数诠释, 我们使用概率解释这个物理量, 故它是平方可积的. 更一般的, 我们考虑波函数的集合 $\mathcal{F}$, 其中的元素平方可积并且可以微分任意次.

借由叠加原理和上面两条性质, 我们容易证明 $\mathcal{F}$ 是一个线性空间. 为了后文叙述方便, 引入希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 及其对偶空间 $\mathcal{H}^*$, 该空间是存在内积的线性空间, 其中元素平方可积并且可以微分任意次; 引入狄拉克符号 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}, \langle\psi| \in \mathcal{H}^*$. 定义一个双线性函数作为 $\mathcal{F}$ 中内积的定义:

$$\langle\phi|\psi\rangle = (\phi, \psi) = \int d^3r \phi^*(r)\psi(r) \tag{1}$$

可以验证其符合内积的定义. 如果 $\langle\phi|\psi\rangle = 0$, 那么说 $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ 正交. $\langle\psi|\psi\rangle = \int d^3r\psi^*(r)\psi(r) \geq 0$, $\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$ 称为 $|\psi\rangle$ 的模. 波函数和狄拉克符号通过 $\langle r|\psi\rangle = \psi(r), \langle p|\psi\rangle = \bar{\psi}(p)$ 联系在一起.

线性算符 A 可视为映射 $A: |\psi\rangle \to |\psi'\rangle$, 即 $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$. 定义厄米共轭 $A^\dagger_{ij} = A^*_{ji}$, 相当于同时做了共轭和转置操作. 算符对左矢作用也是相似的 $\langle\psi'| = \langle\psi| A^\dagger$. 下面给出公式

$$(\langle\phi| A)|\psi\rangle = \langle\phi|(A|\psi\rangle) = \langle\phi| A|\psi\rangle \tag{2}$$

$$\langle\phi| A^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi| A|\phi\rangle^* \tag{3}$$

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \tag{4}$$

$|\phi\rangle\langle\psi|$ 可以视作算符, 它将 $|\psi\rangle$ 变为 $|phi\rangle$. 算符乘积不可交换, 可以定义对易子来衡量交换后的差异 $[A, B] = AB - BA$.

规则

当一个式子中含有常数、右矢、左矢及算符时, 要得到这个式子的厄米共轭式 (或伴随式), 必须:

★代换:

$$\begin{cases} \text{将常数换成其共轭复数} \\ \text{将右矢换成其对应的左矢} \\ \text{将左矢换成其对应的右矢} \\ \text{将算符换成其伴随算符} \end{cases}$$

★反序: 即颠倒各因子的顺序 (但常数的位置无关紧要).

在 $\mathcal{H}$ 中, 我们可以取一组基, 特别地在一组正交完备基下对狄拉克符号和算符的描述称为矩阵表示. 从线性代数的知识中, 我们可以知道任何元素在这组基下都可以唯一展开, 其系数由内积给出.

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i|\psi_i\rangle, c_i = \langle\psi_i|\psi\rangle \tag{5}$$

在这种情况下我们可以写出左右矢的矩阵表示

$$|\psi\rangle = (c_1, \ldots, c_n)^T, \langle\psi| = (c_1, \ldots, c_n) \tag{6}$$

对于正交完备基 $|\psi_i\rangle$, 有如下性质:

$$1 = \sum_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| , \langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij} \tag{7}$$

算符在离散基下可以表示成有限矩阵. 不同的基称为不同的表象, 不同表象下可以靠表象变换 (相似变换) 联系.

但是在处理问题的时候我们时常使用平面波, 但是这种函数并不是平方可积的, 因此其不属于 $\mathcal{F}$ 或 $\mathcal{H}$. 为了处理这种函数, 扩展空间的定义 $\tilde{\mathcal{H}}$ 使其包含这种函数, 并且可以证明这不会破坏线性空间的性质. 引入连续正交基 $|\boldsymbol{r}\rangle \in \tilde{\mathcal{H}}$ 和 $|\boldsymbol{p}\rangle \in \tilde{\mathcal{H}}$. 类比上面的离散基, 我们可以写出一些公式

$$|\psi\rangle = \int d^3 r c(\boldsymbol{r}) |\boldsymbol{r}\rangle , c(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle \tag{8}$$

$$\int d^3 r |\boldsymbol{r}\rangle \langle\boldsymbol{r}| = \int d^3 p |\boldsymbol{p}\rangle \langle\boldsymbol{p}| = 1 \tag{9}$$

$$\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}'\rangle = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'), \quad \langle\boldsymbol{p}|\boldsymbol{p}'\rangle = \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') \tag{10}$$

$$\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \tag{11}$$

最后一个公式可以看成公设. 我们经常对表达式插入第二个公式. 算符在连续基下可以表示成无限矩阵.

	离散基 $\{u_i(\boldsymbol{r})\}$	连续基 $\{w_\alpha(\boldsymbol{r})\}$
正交归一关系式	$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$	$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha-\alpha')$
封闭性关系式	$\sum_i u_i(\boldsymbol{r}) u_i^*(\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$	$\int \mathrm{d}\alpha w_\alpha(\boldsymbol{r}) w_\alpha^*(\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$
波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 的展开式	$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_i c_i u_i(\boldsymbol{r})$	$\psi(\boldsymbol{r}) = \int \mathrm{d}\alpha c(\alpha) w_\alpha(\boldsymbol{r})$
$\psi(\boldsymbol{r})$ 的分量	$c_i = (u_i, \psi) = \int \mathrm{d}^3 r u_i^*(\boldsymbol{r}) \psi(\boldsymbol{r})$	$c(\alpha) = (w_\alpha, \psi) = \int \mathrm{d}^3 r w_\alpha^*(\boldsymbol{r}) \psi(\boldsymbol{r})$
标量积	$(\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$	$(\varphi, \psi) = \int \mathrm{d}\alpha b^*(\alpha) c(\alpha)$
模方	$(\psi, \psi) = \sum_i \lvert c_i\rvert^2$	$(\psi, \psi) = \int \mathrm{d}\alpha \lvert c(\alpha)\rvert^2$

定义算符的本征值和本征矢

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \tag{12}$$

我们约定将本征矢归一化 $|| \, |\psi\rangle \, || = 1$. 线性代数所有中关于特征值和特征向量的理论在这里都适用.
特别地, 对于厄米算符, 可以证明: 1. 其本征值都是实数;2. 不同本征值的本征态正交; 3. 厄米算符的所有本征态构成正交归一基 (可能有简并).
特别地, 对于一组可对易得算符集合, 可以证明: 1. 可对易的算符共享同一套本征值和本征矢, 但简并本征值的本征矢不一定相同; 2. 可对易算符的共同本征矢构成态空间的一个正交归一基; 3. 可对易算符的完全集合 (CSCO), 完全非简并.

下面考虑厄米算符 $\boldsymbol{R}, \boldsymbol{P}$. 分量

$$\boldsymbol{R}_i = X_i, X_i \, |\boldsymbol{r}\rangle = x_i \, |\boldsymbol{r}\rangle \tag{13}$$

$$\boldsymbol{P}_i = P_i, P_i \, |\boldsymbol{p}\rangle = p_i \, |\boldsymbol{p}\rangle \tag{14}$$

在不同表象下, 有

$$\langle \boldsymbol{r} | \, \boldsymbol{P} \, |\psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \, \langle \boldsymbol{r} | \psi \rangle \tag{15}$$

可以证明正则对易关系

$$[R_i, R_j] = [P_i, P_j] = 0, [R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij} \tag{16}$$

定义 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{R} \times \boldsymbol{P}$,

$$[l_\alpha, x_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar x_\gamma \tag{17}$$

$$[l_\alpha, p_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar p_\gamma \tag{18}$$

$$[l_\alpha, l_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar l_\gamma \tag{19}$$

1.2 量子力学的假定

五大假设

第一个假定: 在确定的时刻 t_0, 一个物理体系的态由态空间 $\mathscr{E}$ 中一个特定的右矢 $|\psi(t_0)\rangle$ 来确定.

第二个假定: 每一个可以测量的物理量 $\mathscr{A}$ 都可以用在 $\mathscr{E}$ 空间中起作用的一个算符 A 来描述; 这个算符是一个观察算符.

第三个假定: 每次测量物理量 $\mathscr{A}$, 可能得到的结果, 只能是对应的观察算符 A 的本征值之一.

第四个假定(非简并的离散谱的情况): 若体系处于已归一化的态 $|\psi\rangle$ 中, 则测量物理量 $\mathscr{A}$ 得到的结果为对应观察算符 A 的非简并本征值 a_n 的概率 $\mathscr{P}(a_n)$ 是:

$$\mathscr{P}(a_n) = |\langle u_n|\psi\rangle|^2$$

式中 $|u_n\rangle$ 是 A 的已归一化的本征矢, 属于本征值 a_n.

第四个假定(离散谱的情况): 若体系处于已归一化的态 $|\psi\rangle$ 中, 则测量物理量 $\mathscr{A}$ 得到的结果为对应观察算符 A 的本征值 a_n 的概率 $\mathscr{P}(a_n)$ 是:

$$\mathscr{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2$$

式中 g_n 是 a_n 的简并度, 而 $\{|u_n^i\rangle\}(i = 1, 2, \cdots, g_n)$ 是一组正交归一矢量, 它们在对应于 A 的本征值 a_n 的本征子空间 $\mathscr{E}_n$ 中构成一个基.

第四个假定(非简并连续谱的情况): 测量处于已归一化的态 $|\psi\rangle$ 的体系的物理量 $\mathscr{A}$ 时, 得到介于 α 和 $\alpha + \mathrm{d}\alpha$ 之间的结果的概率 $\mathrm{d}\mathscr{P}(\alpha)$ 是:

$$\mathrm{d}\mathscr{P}(\alpha) = |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2 \mathrm{d}\alpha$$

其中 $|v_\alpha\rangle$ 是与 $\mathscr{A}$ 相联系的观察算符 A 的本征矢, 属于本征值 α.

第五个假定: 如果对处于 $|\psi\rangle$ 态的体系测量物理量 $\mathscr{A}$ 得到的结果是 a_n, 则刚测量之后体系的态是 $|\psi\rangle$ 在属于 a_n 的本征子空间上的归一化的投影 $\dfrac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$.

第六个假定: 态矢量 $|\psi(t)\rangle$ 随时间的演变遵从薛定谔方程:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$$

式中 $H(t)$ 是与体系的总能量相联系的观察算符.

量子化规则:

与粒子的位置 $\boldsymbol{r}(x,y,z)$ 相联系的是观察算符 $\boldsymbol{R}(X,Y,Z)$.
与粒子的动量 $\boldsymbol{p}(p_x,p_y,p_z)$ 相联系的是观察算符 $\boldsymbol{P}(P_x,P_y,P_z)$.

要得到描述一个已有经典定义的物理量 $\mathscr{A}$ 的观察算符 A, 只需在 $\mathscr{A}$ 的经过适当对称化的表达式中, 将 $\boldsymbol{r}$ 与 $\boldsymbol{p}$ 分别换成观察算符 $\boldsymbol{R}$ 与 $\boldsymbol{P}$.

1.3 力学量与波函数的演化

薛定谔绘景: 态演化 $|\psi(t)\rangle$, 力学量一般不含时 A; 海森堡绘景: 态不变 $|\psi\rangle$, 力学量含时 $A(t)$.

$$\frac{d}{dt}\langle A(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle + \langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle \tag{20}$$

一般认为 $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$, 若薛定谔绘景中 $[A,H]=0$, 称 A 为守恒量.

位力定理

$$2\langle T\rangle = \langle \boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle \tag{21}$$

考虑波包的运动,Ehrenfest 定理

$$\frac{d}{dt}\langle\boldsymbol{R}\rangle = \frac{\langle\boldsymbol{P}\rangle}{m} \tag{22}$$

$$\frac{d}{dt}\langle\boldsymbol{P}\rangle = -\langle\nabla V(\boldsymbol{r})\rangle = \langle\boldsymbol{F}(r)\rangle \tag{23}$$

用演化算符 $U(t_2,t_1)$ 描述量子力学的演化, 这和薛定谔方程是等价的. 只考虑哈密顿量不含时, 则 $U(t_2,t_1) = U(t_2-t_1,0) = e^{-iH(t_2-t_1)/\hbar}$. 算符 U

是幺正算符,$U^\dagger U = UU^\dagger = I$. 在薛定谔绘景中,$|\psi(t)\rangle = U(t,0)\,|\psi(0)\rangle$; 在海森堡绘景中,$A(t) = U^\dagger(t,0)AU(t,0)$, 并且有海森堡方程

$$\frac{d}{dt}A(t) = \frac{1}{i\hbar}[A(t), H] \tag{24}$$

平移不变性:

$$[D, H] = 0, D\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r} - \delta\boldsymbol{r}) \to [\boldsymbol{P}, H] = 0 \tag{25}$$

旋转不变性:

$$[R, H] = 0, R\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r} - \delta\varphi\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r}) \to [\boldsymbol{L}, H] = 0 \tag{26}$$

1.4 全同粒子

量子力学中我们无法追踪粒子, 这导致我们本质上无法分辨同一种粒子. 事实上, 同一种粒子的任何性质都相同, 可观测量对于交换粒子的操作是不变的, 这称为波函数的交换对称性. 粒子的全同性使得交换粒子态贡献出一个额外的相位, 其中玻色子对应 0, 费米子对应 $\pm\pi$.

2 三个实例

2.1 一维势场中的粒子

哈密顿量

$$H\psi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x) \tag{27}$$

- 对于同一本征值, 本征矢 ψ_1, ψ_2 满足 $\psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1' = C$
- 束缚态不简并.
- $V(x) = V^*(x)$

- 若 $V(x)=V(-x)$, 则要求解有确定宇称.

无限深方势阱

$$V=\begin{cases}0,0<x<a;\\ \infty,x<0,x>a\end{cases} \tag{28}$$

解得离散谱

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}(0<x<a),E_n=\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2} \tag{29}$$

有限深对称方势阱

$$V=\begin{cases}0,|x|<a/2;\\ V_0,x>a/2\end{cases} \tag{30}$$

由波函数连续和波函数的导数连续 (概率流守恒) 解得 $(0<E<V_0)$

$$\psi(x)\sim\begin{cases}e^{-\beta x},x\geq a/2;\\ \sin kx,\cos kx,x<a/2;\\ e^{\beta x},x\leq a/2\end{cases} \tag{31}$$

其中离散谱满足 $k\tan{(ka/2)}=\beta,\beta=\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar},k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

势垒的透射和反射

$$V=\begin{cases}0,x<0,x>a;\\ V_0,0<x<a\end{cases} \tag{32}$$

$$\psi(x)=\begin{cases}e^{ikx}+Re^{-ikx},x<0;\\ Se^{ikx},x>a;\\ Ae^{\kappa x}+Be^{-\kappa x}\end{cases},\kappa=\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar},k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{33}$$

解得反射系数和透射系数

$$|R|^2 = \frac{(k^2+\kappa^2)^2\mathrm{sech}^2\kappa a}{(k^2+\kappa^2)^2\mathrm{sech}^2\kappa a + 4k^2\kappa^2} \tag{34}$$

$$|S|^2 = \frac{4k^2\kappa^2}{(k^2+\kappa^2)^2\mathrm{sech}^2\kappa a + 4k^2\kappa^2} \tag{35}$$

$$|R|^2 + |S|^2 = 1 \tag{36}$$

对于方势阱, 只需要做替换 $V_0' = -V_0$, 解得共振 (完全透射)

$$k'a = n\pi, E_n = -V_0 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{37}$$

δ 势 $(V = \gamma\delta)$:1. 势垒透射, 有跃变条件

$$\psi'(0+) - \psi'(0-) = \frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0) \tag{38}$$

解得反射系数和透射系数

$$|S|^2 = 1/\left(1 + \frac{m\gamma^2}{2\hbar^2 E}\right) \tag{39}$$

$$|R|^2 = \frac{m\gamma^2}{2\hbar^2 E}/\left(1 + \frac{m\gamma^2}{2\hbar^2 E}\right) \tag{40}$$

2. 势阱, 束缚态, 只有偶宇称

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{-|x|/L}, L = \frac{\hbar^2}{m\gamma} \tag{41}$$

一维谐振子 $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$, 解得

$$\psi_n(x) = A_n e^{-\alpha^2x^2/2}H_n(\alpha x) \tag{42}$$

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \tag{43}$$

其中 H_n 是 Hermite 多项式,

$$A_n = \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right]^{1/2}, \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{44}$$

2.2 中心力场

平面运动, 角动量守恒, 哈密顿量

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2}+V(r)\right] \tag{45}$$

分离变量 $\psi(r,\theta,\varphi)=R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$, 解得

$$\chi_l''+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l=0 \tag{46}$$

其中 $\chi_l=rR_l$, 简并度一般为 $(2l+1)$. 假定 $\lim_{r\to 0}r^2V(r)=0$, 则 $\lim_{r\to 0}\chi_l(r)=0$.

无限深球势阱, 渐进分析后径向化为球贝塞尔方程, 解得

$$R_{kl}(r)=\begin{cases}\frac{1}{r}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{(n_r+1)\pi r}{a},(ka=(n_r+1)\pi),l=0\\ \sqrt{\frac{2}{\pi}}kj_l(kr),(k\sim j_l(ka)=0),l\neq 0\end{cases} \tag{47}$$

$$E_{n_rl}=\begin{cases}\frac{\hbar^2\pi^2(n_r+1)^2}{2\mu a^2},(ka=(n_r+1)\pi),l=0\\ \frac{\hbar^2\xi_{n_rl}}{2\mu a^2},(\xi\sim j_l(\xi_{n_rl}=0)),l\neq 0\end{cases} \tag{48}$$

其中 j_l 是 (第一类) 球贝塞尔函数. 束缚态边界条件强制截断导致量子化.

三维各向同性谐振子 $V(r)=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$, 渐进分析后径向化为合流超几何方程, 解得

$$R_{n_rl}=A_{n_rl}(\alpha r)^le^{-\alpha^2r^2/2}F(-n_r,l+3/2,\alpha^2r^2) \tag{49}$$

$$E_N=(N+3/2)\hbar\omega,N=2n_r+l \tag{50}$$

其中 F 是合流超几何函数, 束缚态边界条件强制截断导致量子化 n_r,

$$A_{n_rl}=\alpha^{3/2}\left[\frac{2^{l+2-n_r}(2l+2n_r+1)!!}{\sqrt{\pi}n_r![(2l+1)!!]^2}\right]^{1/2} \tag{51}$$

$$\alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \tag{52}$$

能级一般简并, 简并度 $f = \frac{1}{2}(N+1)(N+2)$. 事实上, 在直角坐标系中求解和计算简并度更容易, 这两中做法间只差一个表象变换.

氢原子 $V(r) = -\frac{e^2}{r}$, 渐进分析后径向化为合流超几何方程, 解得

$$R_{nl} = N_{nl}\exp(-\xi/2)\xi^l F(-n+l+1, 2l+2, \xi); n = n_r + l + 1 \tag{53}$$

$$E_n = -\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2}; n = 0, 1, \ldots; l = 0, \ldots, n-1; m = -l, \ldots, -1, 0, 1, \ldots, l \tag{54}$$

其中 F 是合流超几何函数,a 是 Bohr 半径, 束缚态边界条件强制截断导致量子化 n,

$$N_{nl} = \frac{2}{a^{3/2}n^2(2l+1)!}\sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}} \tag{55}$$

$$\xi = \frac{2r}{na}, a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \tag{56}$$

于是波函数 $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$, 这就是原子的壳层结构. 能级简并度 $f = n^2$. 径向概率分布

$$P(r, r+dr) = r^2 dr\int d\Omega|\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2 = |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \tag{57}$$

极大值在 $r_n = n^2 a(n_r = n-l-1 = 0)$. 磁矩可以算出,$M_z = -\mu_B m$,$\mu_B = \frac{e\hbar}{2\mu c}$ 是 Bohr 磁子. 对于类氢离子, 对公式做变换 $e^2 \to Ze^2$.

2.3 电磁场中粒子的运动

将电磁场耦合进哈密顿量

$$H = \frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{P} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A})^2 + q\phi \tag{58}$$

已知 $[\boldsymbol{P}, \boldsymbol{A}] = -i\hbar\nabla\cdot\boldsymbol{A}$, 取库伦规范 $\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0$, 展开

$$H = \frac{1}{2\mu}\left[\boldsymbol{P}^2 - \frac{2q}{c}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P} + \left(\frac{q}{c}\right)^2\boldsymbol{A}^2\right]^2 + q\phi \tag{59}$$

可以求出满足概率守恒的表达式

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0,\rho=\psi^*\psi \tag{60}$$

$$\boldsymbol{j}=\frac{1}{2\mu}(\psi^*\boldsymbol{P}\psi-\psi\boldsymbol{P}\psi^*)-\frac{q}{\mu c}\boldsymbol{A}\psi^*\psi=Re(\psi^*\hat{v}\psi) \tag{61}$$

$$\hat{v}=\frac{1}{\mu}(\boldsymbol{P}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}) \tag{62}$$

可以验证哈密顿量在

$$\boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}+\nabla\chi(\boldsymbol{r},t);\phi'=\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\chi(\boldsymbol{r},t) \tag{63}$$

$$\psi'(\boldsymbol{r},t)=\exp\left(\frac{iq}{\hbar c}\chi(\boldsymbol{r},t)\right)\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{64}$$

下是规范不变的, 但是我们可以观测到非平凡的结果, 如 AB 效应等.

正常 Zeeman 效应, 在中心势场中考虑对称规范 $\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}$,

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2\mu}\left[\left(P_x-\frac{eB}{2c}y\right)^2+\left(P_y+\frac{eB}{2c}x\right)^2+P_z^2\right]+V(r) && (65)\\ &= \frac{1}{2\mu}\left[\boldsymbol{P}^2+\frac{eB}{c}l_z+\frac{e^2B^2}{4c^2}(x^2+y^2)\right]+V(r) && (66)\end{aligned}$$

其中 $l_z=xP_y-yP_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$. 小磁场, 略去高阶项

$$H=\frac{1}{2\mu}\boldsymbol{P}^2+\frac{eB}{2\mu c}l_z+V(r) \tag{67}$$

第二项表示外磁场和电子磁矩耦合, 不破坏 CSCO 但给出能级分裂

$$E_{n_rlm}=E_{n_rl}+m\hbar\omega_L \tag{68}$$

其中 $\omega_L=eB/2\mu c$ 是 Larmor 频率,E_{n_rl} 是未与外磁场耦合的屏蔽 Coulomb 场能量.

考虑电子无束缚在均匀磁场中运动, 这将引出 Landau 能级. 1. 取对称规范, 哈密顿量

$$H=H_0+\omega_Ll_z+\frac{P_z^2}{2\mu},H_0=\frac{P_x^2+P_y^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega_L^2(x^2+y^2) \tag{69}$$

可以看出波函数 z 方向是平面波,$\psi(\rho,\varphi)=R(\rho)e^{im\varphi}$, 解径向上的本征方程得

$$R_{n_\rho|m|}(\rho)\propto\rho^{|m|}e^{-\alpha^2\rho^2/2}F(-n_\rho,|m|+1,\alpha^2\rho^2) \tag{70}$$

$$E_N=(N+1)\hbar\omega_L, N=(2n_\rho+|m|+m)=0,2,4\dots \tag{71}$$

其中 F 是合流超几何函数,$\omega_L=eB/2\mu c$ 是 Larmor 频率,

$$\alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega_L}{\hbar}}=\sqrt{\frac{eB}{2\hbar c}} \tag{72}$$

能级简并度为无穷.

2. 取 Landau 规范 $A_x=-By, A_y=A_z=0$, 也可以得到相同的结果, 哈密顿量

$$H=\frac{1}{2\mu}\left[\left(P_x-\frac{eB}{c}y\right)^2+P_y^2+P_z^2\right] \tag{73}$$

上式等效为一个一维谐振子, 在 x 和 z 方向都是平面波, 解得

$$\psi_n(y)\propto e^{-\alpha^2(y-y_0)^2/2}H_n(\alpha(y-y_0)), E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c \tag{74}$$

其中 H_n 是 Hermite 多项式,$\omega_c=eB/\mu c=2\omega_L$ 是回旋角频率,$y_0=cp_x/eB,\alpha=\sqrt{m\omega_c/\hbar}$. 能级无穷度简并. 如果将电子限制在有限空间 S 中, 则简并度 $f=\frac{qBS}{2\pi\hbar}$. 这是一个非束缚态有离散谱的例子.

参考文献

[1] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe. 量子力学 (第一、二卷)

[2] 曾谨言. 量子力学教程

[3] David Tong. Lectures on Solid State Physics