5.复习带电粒子在电磁场中运动

根据牛顿力学，带电粒子的运动方程为:

$$m\ddot{\vec{r}}=q\vec{E}+\frac{q}{c}\dot{\vec{r}}\times\vec{B}$$

其对应的理论力学中，哈密顿量的形式在之前的课程中已经学过，为:

$$H=\frac{1}{2\mu}(\vec{p}-\frac{q\vec{A}}{c})^2+q\phi \qquad \vec{B}=\nabla\times\vec{A} \qquad \vec{E}=-\nabla\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}$$

我们简单检验一下由哈密顿量可以还原回牛顿第二定律，由正则方程

$$\dot{\vec{r}}=\frac{\partial H}{\partial\vec{p}}=\frac{1}{m}(\vec{p}-\frac{q\vec{A}}{c})$$

移项质量有:

$$m\dot{\vec{r}}=(\vec{p}-\frac{q\vec{A}}{c})$$

左右两边都是动量的量纲，实际上，我们常常把左边称为机械动量，记作$\vec{\Pi}$；右边的$\vec{p}$是正则动量，或者称广义动量。然后我们两边对时间求导:

$$m\ddot{\vec{r}}=\frac{d\vec{\Pi}}{dt}=\vec{F}=\dot{\vec{p}}-\frac{q}{c}\frac{d\vec{A}}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial\vec{r}}-\frac{q}{c}\frac{d\vec{A}}{dt}$$

最后一步用到正则方程。下面我们要求出两个偏导，就可以验证是否长得跟牛顿定律一样了。首先考虑正则方程项,慢慢来(如果太快，后面可能会因为指标缩并导致出错)，先简单考虑对r的分量x的求导

$$-\frac{\partial H}{\partial x}=-q\frac{\partial\phi}{\partial x}+\frac{1}{m}(\vec{p}-\frac{q\vec{A}}{c})\cdot\frac{q}{c}\cdot\frac{\partial\vec{A}}{\partial x}=-q\frac{\partial\phi}{\partial x}+\dot{\vec{r}}\cdot\frac{q}{c}\cdot\frac{\partial\vec{A}}{\partial x}$$

最后一步用到了机械动量的代入。我们观察式子的求和符号，矢势$\vec{A}$实际上有三个分量A_x,A_y,A_z，这里对x的求导会带来三项，因此如果是对r的求导，会带来九项，这其实是张量外积，不是之前常用的梯度和旋度作用，这九项是要跟前面的机械动量点乘缩并的，那么究竟是矢势$\vec{A}$的分量A_x,A_y,A_z被缩并，还是坐标空间x,y,z被缩并?处理要是跳步了，就容易出错。

因此，我们强调一下原始哈密顿量的平方的本质，其实是内积操作，哈密顿量是一个标量

$$\sum_i(p_i-\frac{q}{c}A_i)(p^i-\frac{q}{c}A^i)$$

那么这个内积被求偏导，链式法则是不改变这种内积缩并的，最终偏导结果相当于标量被偏导，因此矢量分量由∇决定，因此偏导分量是不进行缩并的，有:

$$-\frac{\partial H}{\partial r_i}=-q\frac{\partial \phi}{\partial r_i}+\frac{q}{c}\sum_{k=1}^{3}\dot{r}_k\frac{\partial A^k}{\partial r_i}$$

如果考虑把$\vec{A}$写成逆变张量A^k,求导算子写成协变作用$(\nabla A)_i^k$,那么与机械动量的缩并就是把机械动量看成了协变张量$\dot{r}_k(\nabla A)_i^k=\dot{r}_k\nabla_i A^k$
我们总是喜欢∇算子的，因此稍微给上式换一个表述：

$$-\frac{\partial H}{\partial \vec{r}}=-q\nabla\phi+\frac{q}{c}\sum_i\vec{\dot{r}}_i(\nabla\vec{A}^i) \tag{1}$$

上面我们显式地写出了求和符号的求和指标，就是为了避免搞混缩并对象(后文会有对比)，或者干脆我们就换个顺序就没这个烦恼了,早该写成这样了。

$$-\frac{\partial H}{\partial \vec{r}}=-q\nabla\phi+\frac{q}{c}\nabla(\vec{\dot{r}}\cdot\vec{A}) \tag{2}$$

下面我们考虑矢势时间全微分的项，首先矢势三个分量都是坐标的函数，坐标是时间的函数，因此要用到链式法则展开，有：

$$\frac{d\vec{A}}{dt}=\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}+\frac{\partial\vec{A}}{\partial\vec{r}}\frac{\partial\vec{r}}{\partial t}=\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}+\vec{\dot{r}}\cdot\nabla\vec{A}=\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}+\nabla\vec{A}\cdot\vec{\dot{r}}$$

上面最后一个等号要表达的物理意义本身是一样的，意思是先对矢势$\vec{A}$求梯度张量，再作用于机械动量，但是出于惯例，左边在流体力学、连续介质力学中经常使用。但是笔者更倾向于右边，因为更符合逆变张量$\vec{\dot{r}}$写作列向量放在矩阵$\nabla\vec{A}$右侧的约定，符合乘法法则。而在矩阵的语言里，如果采取流体力学常用的形式，写在左边，那么容易变成行向量的作用，那么缩并就反了。具体而言,我们期望的矩阵对列向量的缩并是：

$$((\nabla\vec{A})\cdot\vec{\dot{r}})^i=\partial_j A^i\dot{r}^j \tag{3}$$

因为链式法则展开前的矢势$\frac{d\vec{A}}{dt}$，该式子拥有的分量当然是对A_x, A_y而言的，因此期望的结果里A_x是不进行缩并的。另一方面，链式法则插入中间量r，这个r的分量，总是一个在分母偏导一个在分子偏导，是需要x, y, z一一对应的，因此是对坐标进行缩并的。综上所述，我们期望的缩并最好还是写成将r当成逆变张量的形式,放在式子的最右边。

但是啊，我们换个角度，流体力学介质力学里的表述，按照如下的先运算点积来看待，貌似是不会引起歧义的，因此也有可取之处，只要先运算点积就行。

$$\partial_j\dot{r}^j A^i=(\dot{r}\cdot\nabla)\vec{A} \tag{4}$$

但是万一我们先运算了张量积，后运算点积的时候,因为$\dot{r}$写在左边，当成行向量作为协变张量存在,那么就可能搞错了缩并对象，搞成了对A^j的缩并，于是现在变为：

$$\boxed{(\vec{\dot{r}} \cdot \nabla \vec{A})_i = \dot{r}_j \partial_i A^j}$$

这个式子跟之前的正则方程项的张量，式(1) 是一模一样的，正是因为我们搞混了缩并的对象导致的，取与之前式子(1)相减，这会直接导致下面这个不该成立的式子成立，错误原因在于理解错了下面第二项的缩并对象:

$$\boxed{\sum_i \vec{\dot{r}}_i (\nabla \vec{A}^i) - \vec{\dot{r}} \cdot \nabla \vec{A} = 0}$$

因为这个式子实际上不是零，而是是双叉乘公式的一种表述：

$$\sum_i A_i \mathbf{B} C^i - \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \mathbf{C} = \mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C})$$

上面的第一项是式(1)，第二项是式子(4),正确的结果应该是

$$\sum_i \vec{\dot{r}}_i (\nabla \vec{A}^i) - (\vec{\dot{r}} \cdot \nabla) \vec{A} = \vec{\dot{r}} \times (\nabla \times \vec{A})$$

双叉乘公式还有另外一种更常用表述：

$$\mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C})$$

上面第一项是式(2),第二项是式(4),结果是完全一样的。

这里再次提一下式(1)(2)的联系，式(1)的优势是简单易得，只要把微分号放进原本张量内积符号里面就行；式(2)的优势是不容易引起混淆，很容易看出缩并对象。而式(3)(4)中，式(3)的优势是符合矩阵作用于列向量的写法顺序，式(4)的优势是符合惯用约定，同时只要先运算点积，不引起歧义，那么这个其实更容易看出缩并对象。

最后，我们把正则方程微分结果和矢势微分结果结合起来，注意正负号，利用双叉乘公式，可以得到:

$$m\ddot{\vec{r}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}} - \frac{q}{c}\frac{d\vec{A}}{dt} = -q(\nabla \phi + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}) + \frac{q}{c}\dot{\vec{r}} \times (\nabla \times \vec{A})$$

往回代入矢势和标势的定义，就验证了从哈密顿量能拿到牛顿定律，说明这个哈密顿量是正确的。

6.带电粒子电磁场运动量子化

有了哈密顿量，自然就可以进行量子化，显然我们可以写出 Schrödinger 方程和其算符：

$$i\hbar\frac{\partial|\alpha\rangle}{\partial t}=H|\alpha\rangle \qquad H=\frac{1}{2\mu}\left(P-\frac{q}{c}\vec{A}\right)^2+q\phi.$$

在坐标表象下作用于坐标波函数的哈密顿算符形式为

$$\langle\vec{x}'|\hat{H}|\vec{x}\rangle=\left[\frac{1}{2\mu}\left(-i\hbar\nabla_{\vec{x}'}-\frac{q}{c}\vec{A}(\vec{x}')\right)^2+q\phi(\vec{x}')\right]\delta(\vec{x}'-\vec{x}).$$

即用把动量替换成了动量算符，坐标变成坐标算符。这就是正则量子化，一次量子化。其中矢势和标势的形式下面注意事项会讨论。作用于坐标波函数时候把积分$\int dx$用狄拉克函数消去，得到：

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{x}')}{\partial t}=\hat{H}\psi(\vec{x}')=\left[\frac{1}{2\mu}\left(-i\hbar\nabla_{\vec{x}'}-\frac{q}{c}\vec{A}(\vec{x}')\right)^2+q\phi(\vec{x}')\right]\psi(\vec{x}').$$

- 注意事项：
- i. 这里直接把理论力学的哈密顿量改为量子力学的哈密顿算符，修改了动量和坐标部分是没问题的。问题出在电磁场部分，也就是矢势$\vec{A}$和标势ϕ，尽管这两个也是坐标的函数，但是在标准的量子力学里，我们这里把他们视作外场，不需要进行量子化，不需要变成矢势算符。我们要做的只是，在经典力学里把坐标放到矢势标势里面，那么在量子力学里，把坐标算符放到矢势标势里面，也就是说，矢势和标势现在是坐标算符的函数，其可以泰勒展开为无数个坐标算符。如果要考虑电磁场量子化，也就是量子化电磁场（如 QED），这应该是超出了本课程要求的，对于量子化电磁场，deepseek给出的回答是
  - **量子场论扩展**：若需量子化电磁场（如 QED），则$\vec{A}$需展开为光子算符的叠加：

$$\vec{A}(\vec{x})=\sum_\lambda\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}\left(\epsilon_\lambda(\vec{k})a_\lambda(\vec{k})e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}+\mathrm{h.c.}\right),$$

  但此内容超出当前非相对论性量子力学的范畴。
  - 上面就是AI给出的量子化回答，笔者啥也看不懂。但总之在我们这课程里，把电磁场视为经典的，无需量子化，因此矢势的作用机制，其实就是简单的乘法机制。即取出波函数在这个点的概率密度，然后乘以矢势在这个点的取值即可。那么自然，矢势和标势的矩阵元是很容易仿照之前推导坐标算符动量算符矩阵元的过程推导出来的，并且更简单，因为他们作用于波函数直接相乘即可，那么拿到矩阵元之后，哈密顿矩阵元自然如上就有了。
  - 作用上这似乎跟位置算符有点相似，因为二者都是给一个点取值用的。但是差别还是挺大，因为位置算符取出的是位置，这是粒子内禀属性，而矢势取出这个动作得到的是矢势函数本身的结果，这是外加电磁场的属性。另一方面，坐标算符对应坐标本征态，可以张成空间，但是矢势不是算符，没有可能张成空间。
- ii. 关于矢势和动量算符的对易关系。矢势本身虽然是经典的，但是之前我们也说了，其作用就是提取波函数的坐标代入场函数里给出各个分量的结果，那么尽管本质上不同于位置算符，但是其可以看作是位置算符的一种叠加形式，例如如果取标势的定义为$\phi(x)=x$，那么其作用于

波函数的结果就是取出x，这就跟位置算符看上去没区别了，因此求对易关系起来跟位置是差不多的,直接照猫画虎注意一下分量的处理就行

$$\vec{p}\cdot\vec{A}\psi=\sum_{i,j=1}^{3}p_i\cdot A_j\psi=\sum_{i,j=1}^{3}[(-i\hbar\nabla_i)\cdot A_j]\psi+A_j\cdot(-i\hbar\nabla_i)\psi$$

那么对易关系结果，用矢量的表示为:

$$\left[\vec{p},\vec{A}\right]=-i\hbar\nabla\cdot\vec{A}$$

或者用简单点的标量表示:

$$[p_i,A_j]=-i\hbar\nabla_i\cdot A_j\delta_{ij}$$

- 有的同学可能不满意上面的一个“跳步”，即无法接受标势算符跟动量算符的对易关系是求导，下面我们来稍微严格一点地证明。类比一个变量为坐标的函数的泰勒展开，我们考虑一个变量为坐标算符的函数的泰勒展开
- $$f(\hat{\vec{x}})=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(\vec{a})}{n!}(\hat{\vec{x}}-\vec{a})^n$$

其中$f^{(n)}(\vec{a})$是函数f在点$\vec{a}$处的n阶导数，$(\hat{\vec{x}}-\vec{a})^n$表示坐标算符与常数向量$\vec{a}$的差的$n$次幂。那么这个函数与动量的对易式子为

$$\begin{aligned}\left[p_i,f(\hat{\vec{x}})\right]&=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(\vec{a})}{n!}\left[p_i,(\hat{\vec{x}}-\vec{a})^n\right]\\&=-i\hbar\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(\vec{a})}{(n-1)!}(\hat{x}_i-a_i)^{n-1}\\&=-i\hbar\nabla_i\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(\vec{a})}{n!}(\hat{x}_i-a_i)^n\\&=-i\hbar\nabla_i f(\hat{\vec{x}})\end{aligned}$$

第一行到第二行用到了一个数学归纳法得出的结论，这个结论是纯数学的，证明见后面附文，有点无聊，于是用deepseek写的。但我们这个地方的处理，坐标算符采用矢量形式，因此注意一下用完对易关系后只剩下跟动量相同分量的部分了。第二行到第三行是等价的，因为第二行长得就像第三行的求导，于是根据定义就得到了第四行。那么如果对易式子里不再是动量算符的分量，结果也自然就是对应的具有三个分量的求导∇，这样就证明了标势和矢势的动量对易关系。

- 上面证明的是动量算符与坐标算符函数的对易关系，实际上还有一个对易关系是坐标算符与动量算符函数的对易关系，这个我们之前遇到过，在第四节是出现过一次的，其更一般的形式为 $[X, Q(p)] = i\hbar \frac{\partial Q(p)}{\partial p}$，读者自证是不难的，而且这也很有意义，多练多算。
- iv. 不过我们又知道，矢势$\vec{A}$的选取具有很大的任意性，一般而言我们往往会采用库伦规范，使得额外满足条件$\nabla \cdot \vec{A} = 0$。那么在这种库伦规范的条件下，其自然就对易了

作业一

1. 有一道作业题是这样的，在经典电磁场里有几率守恒方程的形式为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot j = 0.$$

这个守恒在各大基础教材都有证明。不过，这个方程在标准量子力学里，也就是上面提到的哈密顿和波函数里，也是成立的，这时其中的各项的含义如下

$$\rho = \psi^* \psi \qquad \vec{j} = \frac{1}{2\mu}(\psi^* \vec{\Pi} \psi + \psi \vec{\Pi}^* \psi^*) \qquad \vec{\Pi} = -i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \vec{A}$$

作业就是证明这个式子成立。把时间求导换成哈密顿算符，直接展开大力出奇迹就行。下面我们给出答案，读者看答案前应该自己先做一遍。

首先时间偏导链式法则:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left(\psi^* \hat{H} \psi - \psi \hat{H}^* \psi^* \right).$$

这里注意链式法则应该是加法，但是复共轭的薛定谔方程会带来负号，因此符号不要搞错了。然后把哈密顿的形式代进入，注意标量部分的标势，肯定会减法抵消，而机械动量算符平方之后有四项，其中矢势平方项也会因为减法抵消，因此还剩下三项，即

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{2\mu i\hbar} \Big[& -\hbar^2 (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) \\ & + i\hbar q/c \Big(\psi^* (\nabla \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \nabla) \psi \\ & + \psi (\nabla \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \nabla) \psi^* \Big) \Big]\end{aligned}$$

注意一下式子里的∇如果是在$\vec{A}$前面的，其会作用于整个$\vec{A}\psi$，现在式子有点复杂，我们不知道化简方向，因此转而先把概率流密度也展开看看

$$\vec{j} = \frac{1}{2\mu} \left[-i\hbar (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{q}{c} \psi^* \vec{A} \psi - \frac{q}{c} \psi \vec{A} \psi^* \right].$$

取散度时候要注意上面本质上都是乘积形式，因此要注意链式法则，我们先看前面一部分的散度结果：

$$\nabla\cdot\vec{j}_1=\frac{1}{2\mu}\left[-i\hbar(\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi)-\nabla\cdot(\psi\nabla\psi^*))\right].$$

直接展开，因此

$$\nabla\cdot\vec{j}_1=\frac{1}{2\mu}\left[-i\hbar(\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^*\nabla^2\psi-\nabla\psi\cdot\nabla\psi^*-\psi\nabla^2\psi^*)\right].$$

注意到$\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi=\nabla\psi\cdot\nabla\psi^*$这两项相消，得到：

$$\nabla\cdot\vec{j}_1=\frac{1}{2\mu}\left[-i\hbar(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*)\right].$$

然后我们看看后面一部分散度

$$\nabla\cdot\vec{j}_2=\frac{1}{2\mu}\left[-\frac{q}{c}(\nabla\cdot(\psi^*\vec{A}\psi)+\nabla\cdot(\psi\vec{A}\psi^*))\right].$$

同样也是链式法则展开，得到

$$\nabla\cdot\vec{j}_2=\frac{1}{2\mu}\left[-\frac{q}{c}(\nabla\psi^*\cdot\vec{A}\psi+\psi^*\nabla\cdot(\vec{A}\psi)+\nabla\psi\cdot\vec{A}\psi^*+\psi\nabla\cdot(\vec{A}\psi^*))\right].$$

现在这个有点复杂，我们好像没啥思绪，但其实不是，因为我们已经距离成功很近了，这是因为上面第一部分的散度$\nabla\cdot\vec{j}_1$，已经形式上跟密度微分的第一项长得只差一个符号，这部分已经可以宣告结束了。

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t}=\frac{1}{2\mu i\hbar}&\left[-\hbar^2(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*)\right.\\&+i\hbar q/c\left(\psi^*(\nabla\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\nabla)\psi\right.\\&\left.\left.+\psi(\nabla\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\nabla)\psi^*\right)\right]\end{aligned}$$

那么现在我们这第二部分的思四项，我们就需要凑成密度微分的第二项的取负即可。也就是要凑出来：

$$-\nabla\cdot\vec{j}_2=\frac{q}{2c\mu}\left(\psi^*(\nabla\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\nabla)\psi+\psi(\nabla\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\nabla)\psi^*\right)$$

但是呢其实已经结果差不多出来了，系数部分已经满足我们就不看系数了，重新给$\nabla\cdot\vec{j}_2$的项排序

$$\begin{aligned}&\psi^*\nabla\cdot(\vec{A}\psi)+\nabla\psi\cdot\vec{A}\psi^*+\psi\nabla\cdot(\vec{A}\psi^*)+\nabla\psi^*\cdot\vec{A}\psi=\\&\qquad\psi^*(\nabla\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\nabla)\psi+\psi(\nabla\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\nabla)\psi^*\end{aligned}$$

上面这个顺序，第一行$\nabla\cdot\vec{j}_2$的第一二三四个加号分别对应下面一行拆完括号的加号，这是因为点乘是可以换顺序的嘛，第一项对应是显然的，第二项对应是换了一下点乘前后，实际上是一个东西，第三第

四项同理，是一样的。而下面一行正好就是之前要证明的密度微分里的项，于是证毕。

数学归纳法证明$\left[p_i, x_j^n\right] = -ni\hbar x_j^{n-1}\delta_{ij}$

1. 基例：对于$n = 1$，

$$[p_i, x_j] = -i\hbar\delta_{ij}.$$

2. 归纳假设：假设对于$n = k$，有

$$\left[p_i, x_j^k\right] = -ki\hbar x_j^{k-1}\delta_{ij}.$$

3. 归纳步骤：对于$n = k + 1$，

$$\begin{aligned}
\left[p_i, x_j^{k+1}\right] &= \left[p_i, x_j \cdot x_j^k\right] \\
&= x_j\left[p_i, x_j^k\right] + [p_i, x_j]\, x_j^k \\
&= x_j(-ki\hbar x_j^{k-1}\delta_{ij}) + (-i\hbar\delta_{ij})x_j^k \\
&= -ki\hbar x_j^k\delta_{ij} - i\hbar x_j^k\delta_{ij} \\
&= -i\hbar(k+1)x_j^k\delta_{ij}.
\end{aligned}$$

因此，归纳成立。值得一提的是读者也可以类似地证明$[p_i^n, x_j]$的结果