# 7.海森堡绘景带电粒子量子化

上一节我们讨论的是薛定谔绘景下的量子化，拿到了波函数的演化公式。那么这一节很自然的，我们要讨论一下海森堡绘景下，毕竟态矢量不动，那么我们感兴趣的就是算符的演化公式

首先任意算符$Q$的海森堡绘景算符演化公式是:

$$\frac{dQ}{dt}=[Q,H]+\frac{\partial Q}{\partial t}\qquad H=\frac{1}{2\mu}\left(P-\frac{q}{c}\vec{A}\right)^2+q\phi.$$

那么显然啊，这里的任意算符如果求的是哈密顿算符随时间的演化那当然没意义，因为我们的哈密顿算符显不含时间，肯定是不变的。或者说，哈密顿算符的演化公式，现在已经求出来了，答案是不演化。好的那么下一步，我们看看体系还有哪些算符，第一个坐标算符$\hat{x}$，第二个经典标势$\phi$，第三个正则动量算符$\hat{p}$，第四个机械动量“算符”$\hat{p}-\frac{qA}{c}$，第五个机械动量算符平方，除此之外就没了。

这里第二个标势不是算符，因为之前说过电磁场本身还是经典的。第三个机械动量被打上了引号，也是因为里面带的矢势也不是算符

下面求这些对易关系:第一个坐标算符，毋庸置疑对易关系很容易求出来，因为哈密顿里要么是动量算符，这对易关系的结果$i\hbar$是显然的，要么就是剩下的作为坐标的函数而存在的标势和矢势，显然是对易的，于是这一项很快就可以求出来，过程如下,第一步列出方程，坐标算符不显含时间是显然的

$$\frac{dx_i}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[x_i,H]+\frac{\partial x_i}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}[x_i,H]$$

然后哈密顿直接代进去，注意标势显然跟坐标算符对易，就不写这一项了。

$$\frac{dx_i}{dt}=\frac{1}{2i\hbar\mu}[x_i,\left(P-\frac{q}{c}\vec{A}\right)^2]$$

下面我们需要展开算符的平方

$$(\vec{P}-\frac{q\vec{A}}{c})^2=\sum_{i=1}^{3}(P_i-\frac{qA_i}{c})^2$$

直接往回套就是

$$\begin{aligned}\frac{dx_i}{dt}&=\frac{1}{2i\hbar\mu}[x_i,\sum_{j=1}^{3}(P_j-\frac{qA_j}{c})^2]\\&=\frac{1}{2i\hbar\mu}\sum_{j=1}^{3}[x_i,(P_j-\frac{qA_j}{c})](P_j-\frac{qA_j}{c})+(P_j-\frac{qA_j}{c})[x_i,(P_j-\frac{qA_j}{c})]\end{aligned}$$

这里第二行用了对易关系的性质，就是对易式里算符高次幂可以拆出一个放到对易前面和后面相乘再相加的形式，不熟练的同学或者没见过的同学自行证明一下下式即可，不过都学量子力学II了不至于没见过：

$$[A,BC]=B[A,C]+[A,B]C$$

现在回到原本对易关系里，显然矢势$\vec{A}$是跟坐标算符对易的，任意的分量都是如此，因此直接不看了，只剩下关键的动量算符与坐标算符的对易关系,这都用了千百回了

$$[x_i,P_j]=i\hbar\delta_{ij}$$

于是原本对易关系里对$j$的求和显然保留跟$i$相同的一项，代入对易关系得到

$$\frac{dx_i}{dt}=\frac{1}{2i\hbar\mu}2i\hbar(P_i-\frac{qA_i}{c})=\frac{1}{\mu}(P_i-\frac{qA_i}{c})$$

上述求的是对分量的式子，因此对其他分量也完全一样，最后可以得到矢量的关系式。如果移项质量，得到下面的式子，那么式子左边就是机械动量

$$\mu\frac{d\vec{x}}{dt}=\vec{\Pi}=\vec{P}-\frac{q\vec{A}}{c}$$

从这个意义上，我们在海森堡绘景下从哈密顿出发，计算坐标算符的演化，结果得到了机械动量的定义

下面求其他算符的演化，之前提到的第二个算符是标势，这个跟刚才求得坐标算符没有本质区别，因为本身其也可以看作加大号的坐标算符，坐标算符是取出坐标就直接用，标势算符是取出坐标代入势场得到取值再乘回去，因此过程很无聊，利用一下上一节末尾给出的矢势与动量对易关系(该关系当然对标势也适用)，我们直接给出答案

$$\frac{d\phi}{dt}=\frac{1}{\mu}\sum_{i=1}^{3}(\nabla_i\phi)\cdot(P_i-\frac{qA_i}{c})=\frac{1}{\mu}(\nabla\phi)\cdot(\vec{P}-\frac{q\vec{A}}{c})$$

对于矢势，过程完全一样:

$$\frac{d\vec{A}}{dt}=\frac{1}{\mu}\sum_{i=1}^{3}(\nabla_iA_i)(P-\frac{qA}{c})=\frac{1}{\mu}(\nabla\cdot\vec{A})(\vec{P}-\frac{q\vec{A}}{c})$$

> 灰色部分已经被删除，这个部分旨在求正则动量的演化方程，本来想大力出奇迹
> 但是过程实在是太恶心，实际上不如求机械动量快，
> 因为机械动量可以利用二级结论进行叉乘的化简，
> 但是正则动量则不行，于是笔者投降了

接下来是之前提到的第三个第四个，正则动量算符和机械动量“算符”的演化方程。考虑到机械动量其中的一部分是正
$$
\frac{d \vec{P}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [ \vec{P},H] = \frac{1}{i\hbar} [ \vec{P}, \sum_{i=1}^3
$$

现在有点棘手，但也还好，首先对易第一项是动量直接不管，第五项利用之前的标势对易关系结论，改为求导就行，

**第二项：$-\frac{qP_iA_i}{c}$**
$$
[ P_j, -\frac{qP_iA_i}{c} ] = -\frac{q}{c} [ P_j, P_iA_i ].
$$

利用对易关系$[ P_j, A_i ] = -i\hbar \nabla_j A_i$，有：
$$
[ P_j, P_iA_i ] = P_i [ P_j, A_i ] + [ P_j, P_i ] A_i = P_i (-i\hbar \nabla_j A_i) + 0 = -i\hbar
$$

因此，
$$
[ P_j, -\frac{qP_iA_i}{c} ] = -\frac{q}{c} (-i\hbar P_i \nabla_j A_i) = \frac{i\hbar q}{c} P_i \
$$

**第三项：$-\frac{qA_iP_i}{c}$**
$$
[ P_j, -\frac{qA_iP_i}{c} ] = -\frac{q}{c} [ P_j, A_iP_i ].
$$

利用对易关系$[ P_j, A_i ] = -i\hbar \nabla_j A_i$，有：
$$
[ P_j, A_iP_i ] = A_i [ P_j, P_i ] + [ P_j, A_i ] P_i = 0 + (-i\hbar \nabla_j A_i) P_i = -i\hbar
$$

因此，
$$
[ P_j, -\frac{qA_iP_i}{c} ] = -\frac{q}{c} (-i\hbar (\nabla_j A_i) P_i) = \frac{i\hbar q}{c} (\
$$

**第四项：$\frac{q^2 A_iA_i}{c^2}$**
$$
[ P_j, \frac{q^2 A_iA_i}{c^2} ] = \frac{q^2}{c^2} [ P_j, A_iA_i ].
$$

利用对易关系$[ P_j, A_i ] = -i\hbar \nabla_j A_i$，有：

```
$$
[ P_j, A_iA_i ] = A_i [ P_j, A_i ] + [ P_j, A_i ] A_i = A_i (-i\hbar \nabla_j A_i) + (-i\hbar \n
$$
```

因此，

```
$$
[ P_j, \frac{q^2 A_iA_i}{c^2} ] = \frac{q^2}{c^2} (-i\hbar (A_i \nabla_j A_i + (\nabla_j A_i) A_
$$
```

受不了了，直接投降，我们还是按照老师上课讲的走

推荐的是求机械动量的对易关系时候利用拆幂，我们先证一个二级结论，其中$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$

$$[\Pi_i, \Pi_j] = \mathrm{i}\hbar \frac{q}{c} \epsilon_{ijk} B_k$$

以$[\Pi_1, \Pi_2]$为例：

$$\begin{aligned}
[\Pi_1, \Pi_2] &= [P_1 - \frac{q}{c} A_1, P_2 - \frac{q}{c} A_2] \\
&= [P_1, P_2] - [P_1, \frac{q}{c} A_2] - [\frac{q}{c} A_1, P_2] + [\frac{q}{c} A_1, \frac{q}{c} A_2] \\
&= -[P_1, \frac{q}{c} A_2] - [\frac{q}{c} A_1, P_2]
\end{aligned}$$

利用$[P, f(X)] = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial f(X)}{\partial X}$结论,值得一提的是之前是不依赖于表象的利用数学归纳法的结论和算符泰勒展开证明的，但这个也可以依赖于坐标表象证明，比较无聊，笔者就不证了：

$$[\Pi_1, \Pi_2] = \mathrm{i}\hbar \frac{q}{c} \frac{\partial A_2}{\partial X_1} - \mathrm{i}\hbar \frac{q}{c} \frac{\partial A_1}{\partial X_2} = \mathrm{i}\hbar \frac{q}{c} (\nabla \times \vec{A})_3$$

上面利用了叉乘的定义，使得看起来简洁了很多。同理$[\Pi_i, \Pi_j] = \mathrm{i}\hbar \frac{q}{c} \epsilon_{ijk} B_k$得证。

那么下面我们来面对完全的哈密顿的机械动量算符的对易，注意机械动量里正则动量不显含时间，然而矢势是可能显含时间的，不要漏了：

$$\frac{d\vec{\Pi}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{\Pi}, H] = \frac{1}{2i\hbar\mu} [\vec{\Pi}, \sum_{i=1}^{3} \Pi_i \Pi_i] + \frac{1}{i\hbar} [\vec{\Pi}, q\phi] - \frac{q}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

其中标势显然是利用对易关系很容易得到的，而前面的乘积对易项会麻烦些，利用对易关系拆幂的性质$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$，我们有

$$\frac{d\vec{\Pi}}{dt} = \frac{1}{2i\hbar\mu} \left( \sum_{i=1}^{3} \Pi_i [\vec{\Pi}, \Pi_i] + [\vec{\Pi}, \Pi_i] \Pi_i \right) - q\nabla\phi - \frac{q}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

注意这里分量有点多也很杂，因此我们慢慢考虑，先看被时间微分的第一个分量

$$\frac{d\Pi_1}{dt}=\frac{1}{2i\hbar\mu}\left(\sum_{i=1}^{3}\Pi_i[\Pi_1,\Pi_i]+[\Pi_1,\Pi_i]\Pi_i\right)-q\nabla_1\phi-\frac{q}{c}\frac{\partial A_1}{\partial t}$$

那么之前证明的二级结论就用上了,依次计算$i=1,2,3$的情况,注意叉乘正负号，得到

$$\begin{aligned}\frac{d\Pi_1}{dt}&=\frac{1}{2i\hbar\mu}\frac{i\hbar q}{c}\left[(\Pi_2B_3+B_3\Pi_2)-(\Pi_3B_2+B_2\Pi_3)\right]-q\nabla_1\phi-\frac{q}{c}\frac{\partial A_1}{\partial t}\\&=\frac{1}{2\mu}\frac{q}{c}\left[(\vec{\Pi}\times\vec{B})_1-(\vec{B}\times\vec{\Pi})_1\right]-q\nabla_1\phi-\frac{q}{c}\frac{\partial A_1}{\partial t}\end{aligned}$$

其中到第二行合并了一下系数，然后利用了一下叉乘的定义。现在发现式子左右只剩下相同的分量，因此很显然其他分量同理，于是对于矢量$\vec{\Pi}$可以得到:

$$\frac{d\vec{\Pi}}{dt}=\frac{1}{2\mu}\frac{q}{c}\left[(\vec{\Pi}\times\vec{B})-(\vec{B}\times\vec{\Pi})\right]-q\nabla\phi-\frac{q}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}$$

这就是我们最终得到的机械动量算符的海森堡绘景下的演化方程，至于要求正则动量算符的演化，那可能只需要把二级结论改为证明$[P_i,\Pi_j]$就行，但是叉乘化简什么的估计就用不了了，那肯定就过程有点复杂了，不过可能也还好。肯定比笔者一开始灰色删除部分大力出奇迹要好。下面我们讨论一下机械动量算符演化的物理意义，我们发现利用电场的定义可以将方程进一步改写,并且我们给质量挪个位置

$$\frac{d\vec{\Pi}}{dt}=\frac{1}{2}\frac{q}{c}\left[(\vec{\Pi}\times\frac{\vec{B}}{\mu})-(\frac{\vec{B}}{\mu}\times\vec{\Pi})\right]+q\vec{E}$$

现在这个公式，左边是机械动量算符的演化方程，右边这个形式，长的像什么?观察一下经典粒子的电磁场牛顿第二定律

$$\vec{F}=m\dot{\vec{v}}=\frac{q}{c}\left[(\vec{v}\times\frac{\vec{B}}{\mu})\right]+q\vec{E}=\frac{q}{2c}\left[(\vec{v}\times\frac{\vec{B}}{\mu})-(\frac{\vec{B}}{\mu}\times\vec{v})\right]+q\vec{E}$$

忽略光速c，这只是单位制导致的。我们发现中括号里面就是洛伦兹力，外则是电场力，等式最左端就是粒子受力，这整个就是牛顿第二定律!
不过对于粒子，叉乘可以再掰开成两瓣，利用一下叉乘换顺序变负号的效果，可以得到跟上面机械动量算符演化的几乎一模一样的形式，这说明，我们似乎在海森堡绘景下导出了牛顿第二定律。
当然了，量子力学里，算符不对易，因此叉乘的换序是不可进行的，也因此不能进一步合并了，但是显然的宏观极限下，对易式可以忽略，此时叉乘可以换序，那么方程就跟宏观牛顿第二定律没有任何区别了。

下面我们求一下磁场跟机械动量的对易结果

## 磁场$\vec{B}$与机械动量$\vec{\Pi}$的对易关系

磁场算符以分量的形式写出：$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$（分量形式：$B_i = \epsilon_{ijk}\partial_j A_k$）

我们将要用到的基本对易关系：

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [p_i, A_j] = -i\hbar\frac{\partial A_j}{\partial x_i}, \quad [A_i, A_j] = 0, \quad [\partial_i, f] = \frac{\partial f}{\partial x_i}$$

准备完成，现在展开对易子：

$$[B_i, \Pi_j] = \left[\epsilon_{i\alpha\beta}\partial_\alpha A_\beta,\, p_j - \frac{q}{c}A_j\right] = \epsilon_{i\alpha\beta}\left[\partial_\alpha A_\beta,\, p_j\right] - \frac{q}{c}\epsilon_{i\alpha\beta}\left[\partial_\alpha A_\beta,\, A_j\right]$$

(a) **计算第一项**：$\epsilon_{i\alpha\beta}[\partial_\alpha A_\beta, p_j]$

注意这里$\partial_\alpha A_\beta$是先进行了算符的乘积运算，因此利用$[fg, h] = f[g, h] + [f, h]g$和$[p_j, f] = -i\hbar\frac{\partial f}{\partial x_j}$：

$$[\partial_\alpha A_\beta, p_j] = \partial_\alpha[A_\beta, p_j] + [\partial_\alpha, p_j]A_\beta = \partial_\alpha\left(i\hbar\frac{\partial A_\beta}{\partial x_j}\right) + 0 \times A_\beta$$

由于微分是可交换的，$\frac{\partial}{\partial x_j}\partial_\alpha = \partial_\alpha\frac{\partial}{\partial x_j}$，因此上面后一项对易置零，于是现在我们有：

$$[\partial_\alpha A_\beta, p_j] = i\hbar\partial_\alpha\frac{\partial A_\beta}{\partial x_j}$$

代入回去：

$$\epsilon_{i\alpha\beta}[\partial_\alpha A_\beta, p_j] = i\hbar\epsilon_{i\alpha\beta}\frac{\partial^2 A_\beta}{\partial x_\alpha\partial x_j} = i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}(\epsilon_{i\alpha\beta}\partial_\alpha A_\beta) = i\hbar\frac{\partial B_i}{\partial x_j}$$

(b) **计算第二项**：$\epsilon_{i\alpha\beta}[\partial_\alpha A_\beta, A_j]$

下面的灰色做法是错误的

> 利用$[\partial_\alpha f, g] = \partial_\alpha[f, g] + [\partial_\alpha, g]f$：
>
> $$[\partial_\alpha A_\beta, A_j] = \partial_\alpha[A_\beta, A_j] + [\partial_\alpha, A_j]A_\beta = 0 + \left(\frac{\partial A_j}{\partial x_\alpha}\right)A_\beta$$
>
> 代入第二项：

> $$\epsilon_{i\alpha\beta}[\partial_\alpha A_\beta, A_j] = \epsilon_{i\alpha\beta}\frac{\partial A_j}{\partial x_\alpha}A_\beta$$
>
> 于是**最终结果**
>
> $$[B_i, \Pi_j] = i\hbar\frac{\partial B_i}{\partial x_j} - \frac{q}{c}\epsilon_{i\alpha\beta}\frac{\partial A_j}{\partial x_\alpha}A_\beta$$
>
> 结果包含$\frac{\partial A_j}{\partial x_\alpha}$，表明对易关系依赖于 **矢势$\vec{A}$的空间变化**。
> 或者总结一下写成矢量对易的形式
>
> $$\boxed{[\vec{B}, \Pi_j] = i\hbar\frac{\partial \vec{B}}{\partial x_j} + \frac{q}{c}\vec{A}\times\nabla A_j}$$
>
> $$\boxed{[\vec{B}, \vec{\Pi}] = i\hbar\nabla\otimes\vec{B} + \frac{q}{c}\vec{A}\times(\nabla\otimes\vec{A})}$$
>
> 其中用到了梯度张量的定义

实际上正确的做法是，可以直接判断第二项是零，因为求导已经作用到了矢势分量上，不会再因为交换顺序而导致什么奇怪的结果，该对易子自然为零。

因此，我们的正确结果是

$$\boxed{[\vec{B}, \Pi_j] = i\hbar\frac{\partial \vec{B}}{\partial x_j}}$$

或者总结一下写成矢量对易的形式

$$\boxed{[\vec{B}, \vec{\Pi}] = i\hbar\nabla\otimes\vec{B}}$$

- **梯度张量$\nabla\otimes\vec{B}$**:
  $\nabla\otimes\vec{B}$是矢势$\vec{B}$的梯度张量（二阶张量），其分量为：

$$(\nabla\otimes\vec{B})_{ij} = \frac{\partial B_j}{\partial x_i}$$

经典极限（$\hbar \to 0$）下，由于$\hbar \to 0$，这一项直接消失，不贡献任何经典效应。这样，我们就严格证明经典极限下对易子为零了