14：势场和规范变换

#Quantum_Mechanics

在经典力学中，我们知道一个势场的零点是无关紧要的。我们现在考虑一个态矢 $|\alpha\rangle$ 在势场 $\tilde{V}(x) = V(x) + V_0$ 中的演化。我们设它在 $V(x)$ 中演化的结果是 $|\alpha, t_0; t\rangle$，那么现在：

$$|\alpha, \tilde{t_0}; t\rangle = \exp\left(-\frac{iV_0(t-t_0)}{\hbar}\right)|\alpha, t_0; t\rangle$$

因此，其实只有一个相位差距。最简单的情况下，假如系统初始处在能量为 E 的本征态上，那么只需要将 E 换成 $E + V_0$ 就行了！
那么我们现在就看到了第一个规范变换！我们令：

$$V(x) \to V(x) + V_0$$

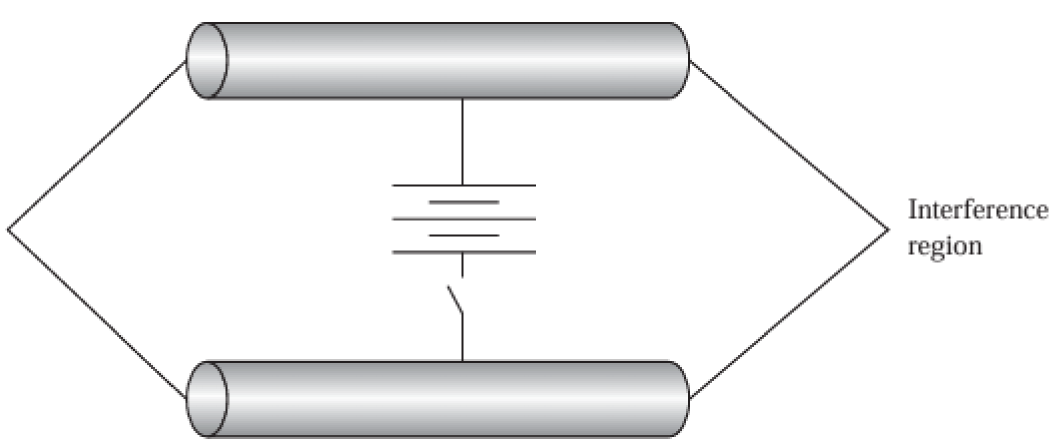
这导致态矢和波函数的变化：

$$|\alpha, t_0; t\rangle \to \exp\left(-\frac{iV_0(t-t_0)}{\hbar}\right)|\alpha, t_0; t\rangle \quad \psi(x', t) \to \exp\left(-\frac{iV_0(t-t_0)}{\hbar}\right)\psi(x', t)$$

假如 V_0 是含时的，那么也很容易得出：

$$|\alpha, t_0; t\rangle \to \exp\left(-\int_{t_0}^{t} dt' \frac{iV_0(t')}{\hbar}\right)|\alpha, t_0; t\rangle$$

于是我们有一个有趣的小实验：将一个粒子束分成两部分，在两部分之间维持一个电势差，之后让两束粒子束干涉，可以观察到它们的相位差明显发生了变化：



现在让我们考虑一下重力场在量子力学中的影响。我们知道在经典力学的运动方程里面，任何在重力场中的自由粒子都以相同的加速度下落。但是在量子力学中，我们却有：

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla^2+m\Phi_{grav}\right]\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

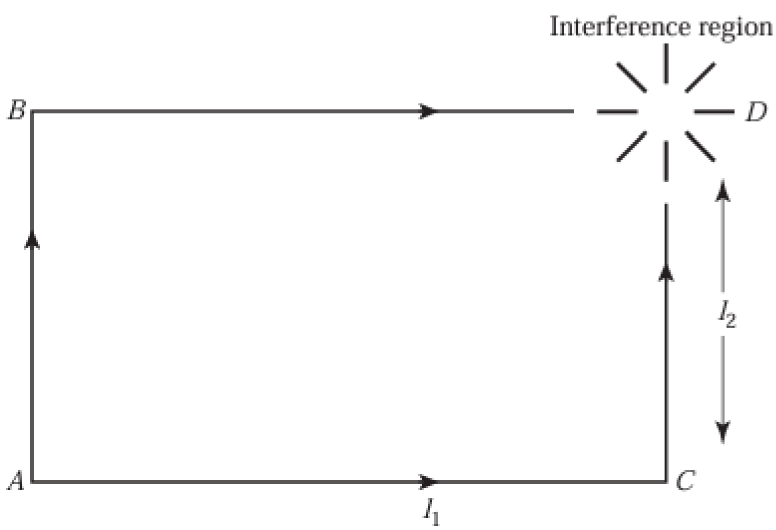
或者从路径积分的角度看：

$$\langle x_n,t_n|x_{n-1},t_{n-1}\rangle=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\exp\left(i\int_{t_{n-1}}^{t_n}dt\frac{\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2-mgz\right)}{\hbar}\right)$$

所以这里我们看到 $\frac{m}{\hbar}$ 这个组合出现，我们没法消去 m！
如果我们只是从埃伦费斯特定理来推平均值的话，那么只会看到：

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle x\rangle=-g\hat{z}$$

这是一个平凡的效应。要是想观测一些非平凡的情况，我们需要把 $\hbar$ 暴露出来。但事实上，直到 1975 年，一直都没有人做这样的实验。这个实验非常难做的一个原因是重力相比于电磁力太弱了。例如，由万有引力束缚的电子和中子系统的基态半径 $a_0=\frac{\hbar^2}{G_N m_e^2 m_n}$ 大约是 10^{13} 光年，这甚至比宇宙半径都大好几个数量级！有一个比较著名的实验，是所谓中子干涉：



如图，这样一个回路最初被放在平面上，之后将 AB 边轻微的抬起，使之与平面夹角为 δ，那么根据之前的推导，两束中子流在达到干涉区时会出现相位差

$$\Delta\phi = -\frac{m_n^2 g l_1 l_2 \lambda \sin\delta}{\hbar^2}$$

这里的 $\lambda = \dfrac{l_1}{v_{wavepacket}}$ 或者你也可以换一种方式理解：中子的能量是守恒的，那么走两边的粒子有动量差，这导致走两边的粒子有波长差，从而有了相位差，从而发生干涉。

接下来我们看最重要的一部分：电磁场的规范变换。我们可以将电磁场写成：

$$E = -\nabla\phi \quad B = \nabla \times A$$

而带电粒子的哈密顿量写成：

$$H = \frac{1}{2m}\left(p - \frac{eA}{c}\right)^2 + e\phi$$

做量子化的时候，由于 $[X, P] \neq 0$，所以 $[A, P] \neq 0$，因此：

$$\left(P - \frac{eA}{c}\right)^2 \to P^2 - \left(\frac{e}{c}\right)(P\cdot A + A\cdot P) + \left(\frac{e}{c}\right)^2 A^2$$

在海森堡绘景下，有：

$$\frac{\mathrm{d}X_i}{\mathrm{d}t} = \frac{P_i - e\dfrac{A_i}{c}}{m}$$

因此，我们这里的 P 是正则动量，而 $\Pi = m\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = P - \dfrac{eA}{c}$ 则是运动学（机械）动量。我们知道。两个不同方向的正则动量算符是对易的，但是机械动量算符不是：

$$[\Pi_i, \Pi_j] = \left(\frac{i\hbar e}{c}\right)\epsilon_{ijk}B_k$$

通过研究 Π 的变化率，我们可以给出：

$$m\frac{\mathrm{d}^2X}{\mathrm{d}t^2} = \frac{\mathrm{d}\Pi}{\mathrm{d}t} = e\left[E + \frac{1}{2c}\left(\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t}\times B - B\times\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t}\right)\right]$$

考虑在磁场中的粒子满足的薛定谔方程：

$$\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla' - \frac{eA(x')}{c}\right)\left(-i\hbar\nabla' - \frac{eA(x')}{c}\right)\langle x'|\alpha\rangle + e\phi(x')\langle x'|\alpha\rangle = i\hbar\langle x'|\alpha\rangle$$

考虑现在的概率流连续性方程：$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla'\cdot j=0$，其中 ρ 还是 ψ^2，但是：

$$j=\left(\frac{\hbar}{m}\right)\mathrm{Im}(\psi^\star\nabla'\psi)-\left(\frac{e}{mc}\right)A|\psi|^2$$

这与之前标量势下的结果有巨大差别。换言之，改变是：

$$\nabla'\to\nabla'-\left(\frac{ie}{\hbar c}\right)A$$

令 $\psi=\sqrt{\rho}\exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right)$，可以得到：

$$j=\left(\frac{\rho}{m}\right)\left(\nabla S-\frac{eA}{c}\right)$$

注意：对 j 进行全空间积分，得到的是机械动量而不是正则动量。

在电动力学中，我们学习过：下面这样的变换不会改变势场给出的 E,B：

$$\phi\to\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\quad A\to A+\nabla\Lambda$$

因此，经典力学中的正则坐标、机械动量是规范不变量，但是正则动量不是！我们期望在量子力学里面看到类似的效果（这是由于前面我们已经看到了类似的类比，例如量子力学中的洛伦兹力），我们考察一下这些量的均值。我们做规范变换
$\tilde{A}=A+\nabla\Lambda$，考察是否有：

$$\langle\alpha|X|\alpha\rangle=\langle\tilde{\alpha}|X|\tilde{\alpha}\rangle$$

也就是说，我们需要找到一个算符 $\mathscr{G}$ ，使得：$|\tilde{\alpha}\rangle=\mathscr{G}|\alpha\rangle$，以及 $\mathscr{G}^\dagger X\mathscr{G}=X$。考虑到机械动量的规范不变性，$\mathscr{G}$ 还应该有一个性质：

$$\mathscr{G}^\dagger\left(P-\frac{eA}{c}-\frac{e\nabla\Lambda}{c}\right)\mathscr{G}=p-\frac{eA}{c}$$

可以验证：

$$\mathscr{G}=\exp\left(\frac{ie\Lambda(x)}{\hbar c}\right)$$

能够符合上面的要求。
除了通过与经典（电动）力学的类比来给出规范变换算符 $\mathscr{G}$ 的具体形式之外，我们也可以直接从薛定谔方程拿到 $\mathscr{G}$ 的形式。考虑：

$$\left(\frac{\left(p-\frac{eA}{c}\right)^2}{2m}+e\phi\right)|\alpha\rangle=i\hbar|\alpha\rangle$$

而在进行规范变换后：

$$\left(\frac{\left(p-\frac{eA}{c}-\frac{e\nabla\Lambda}{c}\right)^2}{2m}+e\phi\right)|\tilde{\alpha}\rangle=i\hbar|\tilde{\alpha}\rangle$$

对比上下两式，立刻得到：

$$|\tilde{\alpha}\rangle=\exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right)|\alpha\rangle \quad \tilde{\psi}(x',t)=\exp\left(\frac{ie\Lambda(x')}{\hbar c}\right)\psi(x')$$

如果我们仍然写成 $\psi=\rho S$ 的形式，那么规范变换使得 $S\to S+\frac{e\Lambda}{c}$。

我们考虑另一件事情：标度变换。有一个函数 $F(x)$，我们希望表达 $F(x+dx)$ 的值，我们可以泰勒展开：

$$F(x+dx)=F(x)+(\nabla F)\cdot dx$$

但是如果我们再使用一个标度变换：

$$1|_{at\ x}\to[1+\Sigma(x)\cdot dx]|_{at\ x+dx}$$

也就是说 $x+dx$ 处的单位 1 比 x 处的单位 1 大了，那么我们必须重新将 $F(x)$ 写为：

$$F(x+dx)|_{rescaled}=F(x)+[(\nabla+\Sigma)F]\cdot dx$$

这里的 $\nabla+\Sigma$ 就像规范不变量 $\nabla-\left(\frac{ie}{\hbar c}\right)A$ 一样。

接下来看点例子。首先出场的是 40 th-CPHO-Final 考察过的 AB 效应：

（3）阿哈罗诺夫-玻姆效应（即 A-B 效应）的实验证明：即使在磁感应强度为零的区域，也可能会因为 $\boldsymbol{A}\neq 0$ 出现磁效应。它揭示了磁矢势 $\boldsymbol{A}$ 的物理意义。用自由电子双缝干涉实验可验证 A-B 效应。在该实验中，双缝（缝宽很小）与屏之间的距离为 D，双缝间距为 d（$d \ll D$）；一根无限长的极细直螺线管垂直放置于电子经过双缝后的路径之间，其单位长度匝数为 n，横截面积为 S，如图 7d 所示。电子源发出的自由电子的动量大小为 p、电荷为 $-e$（$e>0$）。若螺线管中的电流从 0 变化到 I，求中心亮条纹在屏上移动的距离。已知动量为 $\boldsymbol{p}$ 的电子在矢势场 $\boldsymbol{A}$ 中的波矢为 $\boldsymbol{k}=\frac{1}{\hbar}(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A})$，其中 $\hbar$ 为约化普朗克常量。

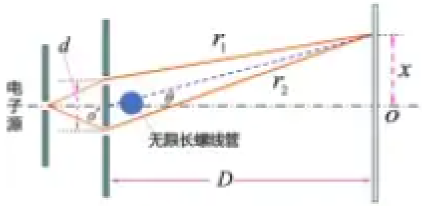
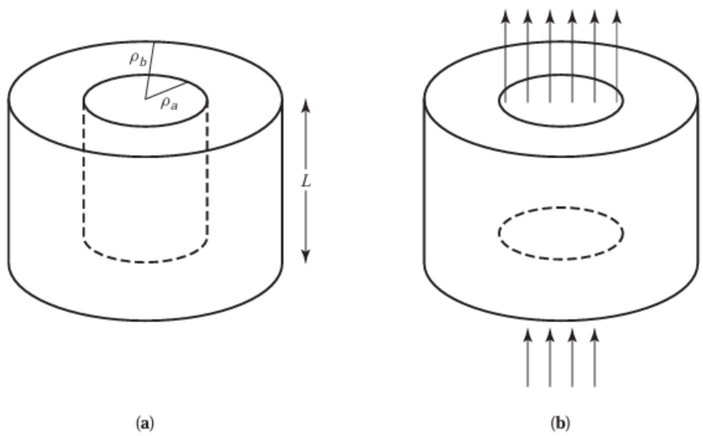


图 7d

我们考虑如下情景：



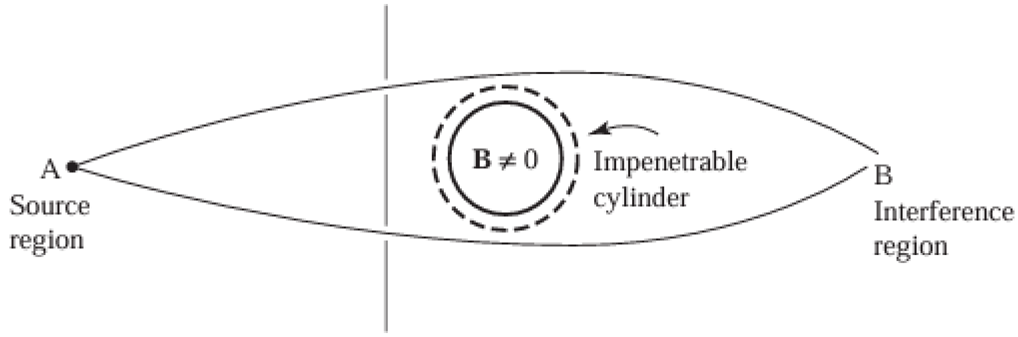
如图，粒子被约束在厚度为 ρ_a, ρ_b 的管壁之间，它的波函数不能穿透管壁。现在在 ρ_a 内部加一个磁场，波函数会发生变化吗？很多人会说不会，但是实际上是会的。注意到匀强磁场 $B = B\hat{z}$ 产生的磁矢势是：

$$A = \left(\frac{B\rho_a^2}{2\rho}\right)\hat{\phi}$$

根据前面的讨论，我们只需要将梯度算子改改：$\nabla \to \nabla - \left(\frac{ie}{\hbar c}\right)A$，特别地：

$$\frac{\partial}{\partial\phi} \to \frac{\partial}{\partial\phi} - \left(\frac{ie}{\hbar c}\right)\frac{B\rho_a^2}{2}$$

现在我们考虑上面题目中描述的标准版 A-B 效应：



我们尝试使用费曼路径积分来解决这个问题。考虑粒子的拉格朗日量：

$$L=\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2+\frac{e}{c}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\cdot A$$

那么每一个环节上的积分都发生了如下的改变：

$$S(n,n-1)\to S(n,n-1)+\frac{e}{c}\int_{t_{n-1}}^{t_n}dt\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)\cdot A=\frac{e}{c}\int_{x_{n-1}}^{x_n}A\cdot ds$$

考虑任意一条从圆柱上面经过的路径和一条从圆柱下面经过的路径，每一条路径的传播子都是

$$\int_{\text{above or below}}\mathscr{D}[x(t)]\exp\left(\frac{iS(N,1)}{\hbar}\right)\Delta\phi_{\text{above or below}}$$

的形式，考察这一对路径的相位差是：

$$\left(\left(\frac{e}{\hbar c}\right)\int_{x_1}^{x_N}A\cdot ds\right)_{above}-\left(\left(\frac{e}{\hbar c}\right)\int_{x_1}^{x_N}A\cdot ds\right)_{below}=\left(\frac{e}{\hbar c}\right)\oint A\cdot ds=\left(\frac{e}{\hbar c}\right)\Phi_B$$

也就是说，上、下两条路径之间被加上了一个恒定的相位差，这就使得光屏上的亮条纹移动了。

接下来我们看看磁单极子。我们想问：为什么在麦克斯韦方程组中没有一项

$$\nabla\cdot B=4\pi\rho_m$$

呢？量子力学要求：假如磁单极子存在，那么它的磁荷量必须是量子化的。考虑这样的一个磁单极子：

$$B=\left(\frac{e_M}{r^2}\right)\hat{r}\quad A=\left[\frac{e_M(1-\cos\theta)}{r\sin\theta}\right]\hat{r}$$

这个磁矢势有一个问题：它在 $\rho = \pi$ 处奇异。但是这没关系——如果磁矢势不奇异，那么 $\nabla \cdot (\nabla \times A) = 0$，根据高斯定理，我们就没有磁单极子了！为了解决这个问题，我们会选取两套矢势：

$$A^{(I)} = \left(\frac{e_M(1-\cos\theta)}{r\sin\theta}\right)\hat{\phi} \quad A^{(II)} = -\left(\frac{e_M(1+\cos\theta)}{r\sin\theta}\right)\hat{\phi}$$

其中 $A^{(I)}$ 在 $\theta < \pi - \epsilon$ 时使用，而 $A^{(II)}$ 在 $\theta > \epsilon$ 处使用。考虑二者重叠的区域，有：

$$A^{(II)} - A^{(I)} = -\left(\frac{2e_M}{r\sin\theta}\right)\hat{\phi} \Rightarrow \Lambda = -2e_M\phi$$

那么两套波函数的关系是：

$$\psi^{(II)} = \exp\left(-\frac{2iee_M\phi}{\hbar c}\right)\psi^{(I)}$$

而 $\psi^{(II)}$ 和 $\psi^{(I)}$ 都是单值的，也就是说，我们将 ϕ 从 0 增加到 2π 时，它们必须返回原来的值。假设 $\psi^{(I)}$ 是单值的，那么 $\psi^{(II)}$ 是单值的条件是：

$$\frac{2ee_M}{\hbar c} = \pm N$$

这就是我们对磁单极子的“磁荷量”提出的要求。