量子力学

Chapter 4. 量子力学体系的时间演化

杨焕雄

中国科学技术大学物理学院

hyang@ustc.edu.cn

October 2, 2023

目录

时间演化算符:

我们已经知道:对于某个力学量 O 的测量,会使量子力学体系从制备好的任意一个量子态 $|\Psi\rangle$ 坍塌到待测力学量 O 对应的力学量算符 $\hat{\mathscr{O}}$ 的某一个本征态 $|o_i\rangle$ 上

$$\text{测量 } O: \qquad |\Psi\rangle \xrightarrow{\quad |\langle o_i|\Psi\rangle|^2 \quad} |o_i\rangle$$

这个坍塌过程是随机的.

- 现在的问题是: 在两次测量之间,体系的态矢量 $|\Psi(t)\rangle$ 如何随时间演化?

倘若采取薛定谔绘景(Schrödinger's Picture),量子力学假设:在两次测量之间,体系态矢量随时间的演化服从因果律

$$\boxed{|\Psi(t_0)\rangle \quad \rightsquigarrow \quad |\Psi(t)\rangle = \hat{\mathscr{U}}(t, t_0)\,|\Psi(t_0)\rangle, \quad (t > t_0)}$$

式中出现的算符 $\hat{\mathscr{U}}(t, t_0)$ 称为态矢量的时间演化算符.

- 与位置坐标 $\boldsymbol{r}$ 不同，无论采取哪种表象，在量子力学中时间 t 都不是体系的力学量算符，它仅仅是刻画体系演化的一个参数而已.[1]

- $\hat{\mathscr{U}}(t, t_0)$ 是态矢量空间中的一个幺正算符，

$$\left[\hat{\mathscr{U}}(t, t_0)\right]^\dagger \hat{\mathscr{U}}(t, t_0) = \hat{I}$$

  这一要求保证了时间演化过程中态矢量的模长不变

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \left[\hat{\mathscr{U}}(t, t_0)\right]^\dagger \hat{\mathscr{U}}(t, t_0) | \Psi(t_0) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \Psi(t_0) \rangle$$

  从而保证了概率守恒.

- $\hat{\mathscr{U}}(t, t_0)$ 满足结合律：

$$\hat{\mathscr{U}}(t_2, t_0) = \hat{\mathscr{U}}(t_2, t_1) \hat{\mathscr{U}}(t_1, t_0)$$

  此处约定 $t_2 > t_1 > t_0$.

- $\mathrm{limit}_{t \to t_0} \hat{\mathscr{U}}(t, t_0) = \hat{I}$

[1]在这一特点上，量子力学与经典力学保持一致.

根据以上对时间演化算符所假设的性质，我们可以写出如下形式的无穷小时间演化算符

$$\boxed{\hat{\mathscr{U}}(t_0+dt,t_0)=\hat{I}-\frac{i}{\hbar}dt\hat{H}}$$

式中出现的 $\hat{H}$ 应为态矢量空间 $\mathcal{H}$ 中的一个厄米算符，

$$\hat{H}=\hat{H}^\dagger$$

从量纲分析可知 $\hat{H}$ 具有能量的量纲．因此，量子力学力学假定：$\hat{H}$ 是体系的 Hamilton 算符．在某些场合中[2]，

$$\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2\mu}+V(\hat{\boldsymbol{r}})$$

把 $\hat{\mathscr{U}}(t,t_0)$ 的无穷小形式与其满足的结合律结合起来可知，

$$\hat{\mathscr{U}}(t+dt,t_0)=\hat{\mathscr{U}}(t+dt,t)\hat{\mathscr{U}}(t,t_0)=\left[\hat{I}-\frac{i}{\hbar}dt\hat{H}\right]\hat{\mathscr{U}}(t,t_0)$$

[2]有例外．

亦即,

$$\hat{\mathscr{U}}(t+dt,t_0)-\hat{\mathscr{U}}(t,t_0)=-\frac{i}{\hbar}dt\hat{H}\hat{\mathscr{U}}(t,t_0)$$

进一步取 $dt\to 0$ 的极限,我们有:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathscr{U}}(t,t_0)=\hat{H}\hat{\mathscr{U}}(t,t_0)$$

这就是时间演化算符服从的 Schrödinger 方程. 若把上式两端同时作用于态矢量 $|\Psi(t_0)\rangle$, 我们看到

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle=\hat{H}\,|\Psi(t)\rangle}$$

这是态矢量满足的 Schrödinger 方程, 它是量子力学的一条基本假设. 倘若 $\hat{H}$ 不显含时间参数 t, 则

$$\hat{\mathscr{U}}(t,t_0)=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right]$$

Schrödinger 方程

取位置表象,

$$|\Psi(t)\rangle = \int d^3x\,|r\rangle\langle r|\Psi(t)\rangle$$

我们用波函数

$$\Psi(r,\ t) := \langle r|\Psi(t)\rangle$$

代替态矢量 $|\Psi(t)\rangle$ 描写体系的状态. $\Psi(r,\ t)$ 服从的时间演化方程是:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,\ t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle r|\Psi(t)\rangle = \langle r|\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle\right] = \langle r|\hat{H}|\Psi(t)\rangle$$

此处默认位置算符的本征右矢 $|r\rangle$ 与相应的左矢 $\langle r|$ 不随时间变化.[3] 引入位置表象波函数空间中的 Hamilton 算符 $\hat{\mathcal{H}}$,

$$\hat{\mathcal{H}}\langle r|\Psi(t)\rangle := \langle r|\hat{H}|\Psi(t)\rangle$$

我们有:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,\ t) = \hat{\mathcal{H}}\Psi(r,\ t)}$$

[3]这是薛定谔绘景的特征.

此式就是著名的薛定谔方程，它描写了两次测量之间波函数 $\Psi(r,\ t)$ 随时间的演化.

1. 倘若

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\hat{r})$$

则不难验证在位置表象波函数空间中，

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)$$

薛定谔方程显示地表为：

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,\ t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)\right]\Psi(r,\ t)}$$

这是原版的薛定谔方程(1926)，Schrödinger 本人在此基础上提出了波函数的概念、并求出了氢原子的玻尔能级公式.

概率守恒定律

按照量子力学的统计诠释,

波函数 $\Psi(\boldsymbol{r},\ t)$ 本身没有物理意义, 但 $|\Psi(\boldsymbol{r},\ t)|^2 d^3x$ 是 t 时刻在位置矢径为 $\boldsymbol{r}$ 的场点处体元 d^3x 中找到粒子的概率.

换言之,

$$\rho(\boldsymbol{r},\ t) := \left|\Psi(\boldsymbol{r},\ t)\right|^2 \geqslant 0$$

是 $\Psi(\boldsymbol{r},\ t)$ 态下在时空中发现粒子的概率体密度. 那么, 波函数的这一概率诠释是否与薛定谔方程相容呢?

我们暂以原版的薛定谔方程为基础讨论此问题. 设势能 $V(\boldsymbol{r})$ 是 $\boldsymbol{r}$ 的实函数,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},\ t) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi(\boldsymbol{r},\ t) + V(\boldsymbol{r})\Psi(\boldsymbol{r},\ t)$$

意味着

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(\boldsymbol{r},\ t) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi^*(\boldsymbol{r},\ t) + V(\boldsymbol{r})\Psi^*(\boldsymbol{r},\ t)$$

结合以上两式可知:

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho(r,\ t) &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi(r,\ t)\right|^2 \\
&= \Psi^*(r,\ t)\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,\ t)\right] + \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(r,\ t)\right]\Psi(r,\ t) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\Psi^*(r,\ t)\ \nabla^2\Psi(r,\ t) - \Psi(r,\ t)\ \nabla^2\Psi^*(r,\ t)\right] \\
&= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\cdot\left[\Psi^*(r,\ t)\ \nabla\Psi(r,\ t) - \Psi(r,\ t)\ \nabla\Psi^*(r,\ t)\right]
\end{aligned}
$$

亦即,

$$
\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho(r,\ t) + \nabla\cdot J(r,\ t) = 0}
$$

这就是量子力学中的概率守恒定律, 它与不等式 $\rho(r,\ t) \geqslant 0$ 构成了波函数概率诠释的逻辑基础. 式中

$$
J(r,\ t) := \frac{\hbar}{2i\mu}\left[\Psi^*(r,\ t)\ \nabla\Psi(r,\ t) - \Psi(r,\ t)\ \nabla\Psi^*(r,\ t)\right]
$$

称为概率流密度矢量.

为了看清概率守恒定律的意义，考虑空间中一个固定的区域 Ω，设其边界为闭合曲面 S. 求 $\partial\rho(\boldsymbol{r},\ t)/\partial t$ 在 Ω 上的体积分，我们有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega d^3x\,\rho(\boldsymbol{r},\ t) &= \int_\Omega d^3x\,\frac{\partial}{\partial t}\rho(\boldsymbol{r},\ t) = -\int_\Omega d^3x\,\nabla\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},\ t)\\ &= -\oint_S d\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},\ t)\end{aligned}$$

所以，倘若 Ω 中找到粒子的概率随时间有增加，必定有概率流通过边界面 S 进入到了 Ω 内. 这正是概率守恒的意义. 倘若 Ω 为全空间，上式简化为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int d^3x\,\rho(\boldsymbol{r},\ t) = 0$$

换言之，若体系在 $t_0 \to t$ 时间间隔中经历的是不涉及测量的自然演化，则必有

$$1 = \int d^3x\left|\Psi(\boldsymbol{r},\ t_0)\right|^2 = \int d^3x\left|\Psi(\boldsymbol{r},\ t)\right|^2$$

即波函数的归一化条件不随时间改变，量子力学描写的粒子不会凭空地产生或消失.

以下除非特别声明，我们将仅仅考虑 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 不显含时间 t 的情形．此情形下，亦称 $\hat{H}$ 为体系的能量算符．

量子力学假设：$\hat{H}$ 是力学量算符．因此，能量本征值方程

$$\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$$

必定是有解的．

- $\hat{H}$ 是厄米算符，能量本征值 E 仅取实数值，属于不同能量本征值的能量本征右矢彼此正交．
- $\hat{H}$ 是力学量算符，能量本征右矢的全体 $\{|E\rangle\}$ 形成态矢量空间 $\mathcal{H}$ 的一组完备基．
- 若体系处在束缚态，$\hat{H}$ 的本征值一般形成离散谱：

  $$\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle, \quad n = 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$$

  所以，体系处于束缚态时其能量本征右矢系满足的正交归一条件与完备性条件分别表为

  $$\langle E_m|E_n\rangle = \delta_{mn}, \qquad \sum_n |E_n\rangle\langle E_n| = \hat{I}$$

定态 (Stationary States)

1. 倘若体系处在某个能量本征态，或者处在包括 $\hat{H}$ 在内的一组相容力学量算符完全集 (CSCO) 的某个共同本征态，则称体系处在定态 (Stationary state).

一言蔽之，定态就是体系的某一能量本征态 $|E\rangle$. 能量本征值方程:

$$\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$$

也可称为定态薛定谔方程.

需要特别指出的是：虽然某一个能量本征右矢描写的量子态是定态，但属于不同能量本征值的几个能量本征右矢的线性组合不是定态. 例如能量本征态的叠加态

$$|\psi\rangle = c_1|E_1\rangle + c_2|E_2\rangle$$

当 $E_1 \neq E_2$ 时就不是定态.[4]

[4]但这个 $|\psi\rangle$ 仍是体系的一个可能的量子态.

现在我们讨论定态在两次测量之间的时间演化方式. 为方便计, 我们首先用定态的投影算符 $|E_n\rangle\langle E_n|$ 把时间演化算符表达出来:

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathscr{U}}(t, t_0) &= \exp\left[-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar\right] = \exp\left[-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar\right]\hat{I} \\
&= \exp\left[-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar\right]\left[\sum_n |E_n\rangle\langle E_n|\right] \\
&= \sum_n \exp\left[-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar\right]|E_n\rangle\langle E_n| \\
&= \sum_n \left[\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-i)^k(t-t_0)^k}{\hbar^k\, k!}\hat{H}^k|E_n\rangle\right]\langle E_n| \\
&= \sum_n \left[\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-i)^k(t-t_0)^k}{\hbar^k\, k!}(E_n)^k\right]|E_n\rangle\langle E_n|
\end{aligned}
$$

亦即,

$$
\boxed{\hat{\mathscr{U}}(t, t_0) = \sum_n \exp\left[-iE_n(t-t_0)/\hbar\right]|E_n\rangle\langle E_n|}
$$

因此,

- 倘若体系在初始时刻 t_0 处于某定态 $|\Psi(t_0)\rangle = |E_n\rangle$, 自然演化到 t 时刻后其态矢量变为

$$
\begin{aligned}
|\Psi(t)\rangle &= \hat{\mathscr{U}}(t, t_0)\,|\Psi(t_0)\rangle = \left[\sum_m e^{-iE_m(t-t_0)/\hbar}\,|E_m\rangle\langle E_m|\right]|E_n\rangle \\
&= \sum_m e^{-iE_m(t-t_0)/\hbar}\,|E_m\rangle\langle E_m|E_n\rangle \\
&= \sum_m e^{-iE_m(t-t_0)/\hbar}\,|E_m\rangle\,\delta_{mn} \\
&= e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}\,|E_n\rangle
\end{aligned}
$$

注意到

$$
\hat{H}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}\left[e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}\,|E_n\rangle\right] = e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}E_n\,|E_n\rangle = E_n\,|\Psi(t)\rangle
$$

$|\Psi(t)\rangle$ 仍是 $\hat{H}$ 属于能量本征值 E_n 的能量本征态,(在态矢量概率诠释的意义下)与 $|\Psi(t_0)\rangle$ 在物理上完全等价. 定态随时间的自然演化仅仅是增加了一个在物理上无关紧要的整体相因子 $e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}$.

- 倘若体系在初始时刻 t_0 处在若干个定态的叠加态,

$$|\Psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n |E_n\rangle$$

自然演化到 t 时刻后,量子态变为:

$$\begin{aligned}
|\Psi(t)\rangle &= \hat{\mathscr{U}}(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle = \left[\sum_m e^{-iE_m(t-t_0)/\hbar}|E_m\rangle\langle E_m|\right]\sum_n c_n|E_n\rangle \\
&= \sum_n c_n\left[\sum_m e^{-iE_m(t-t_0)/\hbar}|E_m\rangle\langle E_m|E_n\rangle\right] \\
&= \sum_n c_n\left[\sum_m e^{-iE_m(t-t_0)/\hbar}|E_m\rangle\delta_{mn}\right] \\
&= \sum_n c_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}|E_n\rangle
\end{aligned}$$

因为求和 $\sum_n$ 的存在,$|\Psi(t)\rangle$ 表达式右端的 $e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}$ 是以叠加式中各项之间相对相因子的身份出现的,它无法保证 $|\Psi(t)\rangle$ 与初始态矢量 $|\Psi(t_0)\rangle$ 仅差一个整体性的幺模相因子. $\rightsquigarrow$ $|\Psi(t)\rangle$ 与 $|\Psi(t_0)\rangle$ 在物理上不等价.

位置表象中的定态薛定谔方程

让我们回过头来再对定态做些讨论.

- 选择位置表象后, 定态薛定谔方程可重新表为:

$$\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle \quad \rightsquigarrow \quad \langle \boldsymbol{r}|\hat{H}|E\rangle = E\langle \boldsymbol{r}|E\rangle$$

按下式引入位置表象波函数空间中等效的 Hamilton 算符 $\hat{\mathcal{H}}$

$$\hat{\mathcal{H}}\langle \boldsymbol{r}|\Psi\rangle := \langle \boldsymbol{r}|\hat{H}|\Psi\rangle, \qquad \forall\ |\Psi\rangle \in \mathcal{H}$$

并约定 $\langle \boldsymbol{r}|E\rangle := \psi_E(\boldsymbol{r})$, 我们可以在位置表象中把定态薛定谔方程等价地表为:

$$\hat{\mathcal{H}}\psi_E(\boldsymbol{r}) = E\,\psi_E(\boldsymbol{r})$$

倘若 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\hat{\boldsymbol{r}})$, 则定态薛定谔方程显示地写为:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi_E(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})\psi_E(\boldsymbol{r}) = E\,\psi_E(\boldsymbol{r})}$$

- 定态波函数 $\psi_E(r)$ 随时间的自然演化仅仅是增加了一个物理上无关紧要的整体相因子,

$$\psi_E(r,\ t) = \psi_E(r) e^{-iEt/\hbar}$$

因此,若体系处在 $\psi_E(r)$ 描写的定态下,其位置分布的概率密度与概率流密度矢量均不随时间改变:

$$\rho_E(r,\ t) = \left|\psi_E(r,\ t)\right|^2 = \left|\psi_E(r)\right|^2 = \rho_E(r)$$

$$\begin{aligned} J_E(r,\ t) &= \frac{\hbar}{2i\mu}\Big[\psi_E^*(r,\ t)\ \nabla\psi_E(r,\ t) - \psi_E(r,\ t)\ \nabla\psi_E^*(r,\ t)\Big] \\ &= \frac{\hbar}{2i\mu}\Big[\psi_E^*(r)\ \nabla\psi_E(r) - \psi_E(r)\ \nabla\psi_E^*(r)\Big] \\ &= J_E(r) \end{aligned}$$

概率守恒定律退化为:

$$\nabla \cdot J_E(r) = 0$$

力学量平均值的时间演化规律

现在讨论力学量系综平均值随时间的自然演化. 基于一般性的考虑，我们不排除力学量 $\mathscr{O}$ 对于时间参数 t 的依赖，所以暂设对应的力学量算符 $\hat{\mathscr{O}}$ 显含时间 t

$$\hat{\mathscr{O}} = \hat{\mathscr{O}}(t)$$

$\mathscr{O}$ 在量子态 $|\Psi(t)\rangle$ 下的系综平均值为：

$$\left\langle \hat{\mathscr{O}} \right\rangle_{\Psi} = \langle \Psi(t) | \hat{\mathscr{O}}(t) | \Psi(t) \rangle$$

由于 $|\Psi(t)\rangle$ 随时间的演化遵从含时薛定谔方程，

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \qquad \rightsquigarrow \qquad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi(t)| = \langle \Psi(t)| \hat{H}$$

我们看到：

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left\langle \hat{\mathscr{O}} \right\rangle_{\Psi} = \left\langle \frac{\partial \hat{\mathscr{O}}}{\partial t} \right\rangle_{\Psi} + \frac{1}{i\hbar} \left\langle \left[\hat{\mathscr{O}},\ \hat{H} \right] \right\rangle_{\Psi}}$$

具体考虑粒子的位置矢径 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 与动量 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的系综平均值随时间的演化. 此二力学量算符都不显含时间参数 t. 因此,

$$\left\langle\frac{\partial\hat{\boldsymbol{r}}}{\partial t}\right\rangle_{\Psi}=\left\langle\frac{\partial\hat{\boldsymbol{p}}}{\partial t}\right\rangle_{\Psi}=0$$

设

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+V(\hat{\boldsymbol{r}}),\qquad V(\hat{\boldsymbol{r}})=\sum_{m,n,l=0}^{\infty}v_{mnl}\,\hat{x}_1^m\,\hat{x}_2^n\,\hat{x}_3^l$$

则利用量子力学基本对易关系

$$\left[\hat{x}_i,\ \hat{p}_j\right]=i\hbar\delta_{ij},\qquad\left[\hat{x}_i,\ \hat{x}_j\right]=\left[\hat{p}_i,\ \hat{p}_j\right]=0$$

不难求得:

$$\left[\hat{x}_i,\ \hat{H}\right]=i\hbar\frac{\hat{p}_i}{\mu},\qquad\left[\hat{p}_i,\ \hat{H}\right]=-i\hbar\frac{\partial V(\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial\hat{x}_i},\qquad(i=1,\ 2,\ 3)$$

或者等价地,

$$\boxed{\left[\hat{\boldsymbol{r}},\ \hat{H}\right]=i\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{\mu},\qquad\left[\hat{\boldsymbol{p}},\ \hat{H}\right]=-i\hbar\,\nabla V(\hat{\boldsymbol{r}})}$$

所以，

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{\boldsymbol{r}}\rangle_\Psi = \frac{\langle\hat{\boldsymbol{p}}\rangle_\Psi}{\mu}, \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{\boldsymbol{p}}\rangle_\Psi = -\langle\nabla V(\hat{\boldsymbol{r}})\rangle_\Psi}$$

这个方程组称为 Ehrenfest 定理.

- 可把 Ehrenfest 定理看做是在保守力场 $V(\boldsymbol{r})$ 中运动的经典质点所服从的哈密顿正则方程

  $$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} = \frac{\boldsymbol{p}}{\mu}, \qquad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = -\nabla V(\boldsymbol{r})$$

  在量子力学中的对应.

- 从 Ehrenfest 定理可知：倘若体系处于某个定态[5]，则在此态下必有

  $$\langle\hat{\boldsymbol{p}}\rangle_\Psi = \langle\nabla V(\hat{\boldsymbol{r}})\rangle_\Psi = 0$$

[5]即 $|\Psi(t)\rangle$ 是体系的某个能量本征态.

绘景 (Picture)

不涉及力学量的测量时，态矢量和力学量算符是否随时间演化取决于绘景 (Picture) 的选择. 通常存在三种候选绘景：

1. 薛定谔绘景
2. 海森堡绘景
3. 相互作用绘景

- 倘若采取薛定谔绘景，则意味着假设态矢量随时间演化

$$\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0):\qquad |\Psi(t_0)\rangle \ \rightsquigarrow\ |\Psi(t)\rangle_S = \hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\,|\Psi(t_0)\rangle$$

但体系的力学量算符 $\hat{\mathscr{A}}$ 以及确定表象时所选择的态矢量空间的基矢系 $\{|f_i\rangle\}$ 不随时间变化，$\hat{\mathscr{A}}_S(t) = \hat{\mathscr{A}}$.

态矢量也罢、力学量算符也罢，都不是真正的可观测量. 真正可观测的物理量是态矢量的内积和力学量算符在两个态矢量之间的矩阵元

$$\langle\psi|\phi\rangle, \quad \langle\psi|\hat{\mathscr{A}}|\phi\rangle$$

它们解释为跃迁概率幅.

所以，当体系自然演化时，在薛定谔绘景中

$$\langle\psi(t_0)|\phi(t_0)\rangle \rightsquigarrow \langle\psi(t)|\phi(t)\rangle_S = \langle\psi(t_0)|\left[\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\right]^\dagger \hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)|\phi(t_0)\rangle$$
$$= \langle\psi(t_0)|\phi(t_0)\rangle$$

$$\langle\psi(t_0)|\hat{\mathscr{A}}|\phi(t_0)\rangle \rightsquigarrow \langle\psi(t)|\hat{\mathscr{A}}_S(t)|\phi(t)\rangle_S$$
$$= \langle\psi(t_0)|\left[\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\right]^\dagger \hat{\mathscr{A}}\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)|\phi(t_0)\rangle$$

此二式确定的矩阵元随时间的演化是物理可观测量，不应依赖于绘景的选择. 这一论断暗示量子力学理论允许存在另一绘景，称为海森堡绘景：

- 态矢量不随时间演化

$$\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0):\qquad |\Psi(t_0)\rangle \rightsquigarrow |\Psi(t)\rangle_H = |\Psi(t_0)\rangle$$

- 力学量算符随时间演化

$$\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0):\qquad \hat{\mathscr{A}} \rightsquigarrow \hat{\mathscr{A}}_H(t) = \left[\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\right]^\dagger \hat{\mathscr{A}}\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)$$

所以，薛定谔绘景与海森堡绘景之间的变换关系是：

$$\boxed{|\Psi(t)\rangle_H = \left[\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\right]^\dagger |\Psi(t)\rangle_S\,, \qquad \hat{\mathscr{A}}_H(t) = \left[\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\right]^\dagger \hat{\mathscr{A}}_S(t)\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)}$$

或者，

$$\boxed{|\Psi(t)\rangle_S = \hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\,|\Psi(t)\rangle_H\,, \qquad \hat{\mathscr{A}}_S(t) = \hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\hat{\mathscr{A}}_H(t)\left[\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\right]^\dagger}$$

式中出现的幺正算符 $\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)$ 是时间演化算符

$$\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0) = \exp\left[-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar\right]$$

切记：

1. $|\Psi(t)\rangle_H = |\Psi(t_0)\rangle$
2. $\hat{\mathscr{A}}_S(t) = \hat{\mathscr{A}}$

实际上是不随时间变化的.

选定了绘景后，还可进一步选择力学量表象. 现在的问题是，力学量表象的基矢系怎样随时间演化?

- 假设我们首先选择了薛定谔绘景，在此基础上又选择了 $\mathscr{F}$ 表象:

$$\hat{\mathscr{F}}_S = \hat{\mathscr{F}}_S^\dagger, \quad \hat{\mathscr{F}}_S|f_i\rangle_S = f_i|f_i\rangle_S, \quad {}_S\langle f_i|f_j\rangle_S = \delta_{ij}, \quad \sum_i |f_i\rangle_S\, {}_S\langle f_i| = \hat{I}$$

  除非 $\hat{\mathscr{A}}_S$ 显含时间参数 t，我们认为 $\hat{\mathscr{A}}_S$ 以及它在 $\mathscr{F}$ 表象中的矩阵实现

$$\mathscr{A}_{ij}^{(S)} = {}_S\langle f_i|\hat{\mathscr{A}}_S|f_j\rangle_S$$

  均不随时间演化.

1. 在薛定谔绘景中，任一选定的力学量表象 $\mathscr{F}$ 的基矢系 $\{|f_i\rangle_S\}$ 及其对偶 $\{{}_S\langle f_i|\}$ 均不随时间演化.
2. 力学量 $\mathscr{A}$ 的矩阵元

$$\mathscr{A}_{ij}^{(S)} = {}_S\langle f_i|\hat{\mathscr{A}}_S|f_j\rangle_S$$

   属于物理上的可观测量[6]，事实上它不依赖于绘景的选择.

---

[6]其模方代表力学量 $\mathscr{A}$ 导致的体系从 $|f_j\rangle_S$ 到 $|f_i\rangle_S$ 的跃迁概率.

- 海森堡绘景中的情形有所不同. 在海森堡绘景中, 建立 $\mathscr{F}$ 表象的力学量算符 $\hat{\mathscr{F}}_H$ 也是随时间演化的

$$\hat{\mathscr{F}}_H(t) = \left[\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\right]^\dagger \hat{\mathscr{F}}_S\, \hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)$$

设其本征值方程为,

$$\hat{\mathscr{F}}_H(t)\,|f_i\rangle_H = f_i\,|f_i\rangle_H$$

则不难看到:

$$|f_i\rangle_H = \left[\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\right]^\dagger |f_i\rangle_S, \qquad {}_H\langle f_i| = {}_S\langle f_i|\,\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0).$$

事实上,

$$\begin{aligned}\hat{\mathscr{F}}_H(t)\,|f_i\rangle_H &= \left[\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\right]^\dagger \hat{\mathscr{F}}_S \hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\left[\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\right]^\dagger |f_i\rangle_S \\ &= \left[\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\right]^\dagger \hat{\mathscr{F}}_S\,|f_i\rangle_S = f_i \left[\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\right]^\dagger |f_i\rangle_S \\ &= f_i\,|f_i\rangle_H\end{aligned}$$

所以, 在海森堡绘景中, 任一选定的力学量表象 $\mathscr{F}$ 的基矢系 $\{\,|f_i\rangle_H\}$ 及其对偶 $\{\,{}_H\langle f_i|\,\}$ 都是随时间演化的.

下面在海森堡绘景中计算力学量算符 $\hat{\mathscr{A}}_H(t)$ 在 $\mathscr{F}$ 表象中的矩阵元:

$$\begin{aligned}
\mathscr{A}_{ij}^{(H)} &= {}_H\langle f_i|\hat{\mathscr{A}}_H(t)|f_j\rangle_H \\
&= {}_S\langle f_i|\hat{\mathscr{U}}(t,t_0)\left[\hat{\mathscr{U}}(t,t_0)\right]^\dagger \hat{\mathscr{A}}_S\hat{\mathscr{U}}(t,t_0)\left[\hat{\mathscr{U}}(t,t_0)\right]^\dagger|f_j\rangle_S \\
&= {}_S\langle f_i|\hat{\mathscr{A}}_S|f_j\rangle_S \\
&= \mathscr{A}_{ij}^{(S)}
\end{aligned}$$

这个计算表明,力学量算符在选定表象中的矩阵实现不依赖于绘景的选择. 此结论正是我们从可观测量视角所期待的.

既然如此,不妨在上述力学量矩阵元表达式中擦除掉绘景的痕迹:

$$\mathscr{A}_{ij}^{(H)} = \mathscr{A}_{ij}^{(S)} = \mathscr{A}_{ij}$$

进而,

$$\boxed{\hat{\mathscr{A}}_H(t) = \sum_{ij}\mathscr{A}_{ij}\,|f_i\rangle_H\,{}_H\langle f_j|, \qquad \hat{\mathscr{A}}_S = \sum_{ij}\mathscr{A}_{ij}\,|f_i\rangle_S\,{}_S\langle f_j|}$$

很明显,上述算符表达式与力学量算符在两种绘景之间的联系

$$\hat{\mathscr{A}}_H(t) = \left[\hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)\right]^\dagger \hat{\mathscr{A}}_S\, \hat{\mathscr{U}}(t,\ t_0)$$

是自洽的.

- 立足海森堡绘景,我们现在考察力学量算符 $\hat{\mathscr{A}}_H(t)$ 随时间演化的规律. 默认 $\hat{\mathscr{A}}_S$ 不显含时间参数 t,我们有

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathscr{A}}_H(t)}{\mathrm{d}t} = \left[\frac{\partial \hat{\mathscr{U}}^\dagger}{\partial t}\right] \hat{\mathscr{A}}_S \hat{\mathscr{U}} + \hat{\mathscr{U}}^\dagger \hat{\mathscr{A}}_S \left[\frac{\partial \hat{\mathscr{U}}}{\partial t}\right]$$

因为时间演化算符满足含时薛定谔方程,

$$\frac{\partial \hat{\mathscr{U}}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\hat{\mathscr{U}}, \qquad \rightsquigarrow \quad \frac{\partial \hat{\mathscr{U}}^\dagger}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\hat{\mathscr{U}}^\dagger \hat{H}$$

所以,

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathscr{A}}_H(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\mathscr{U}}^\dagger \hat{\mathscr{A}}_S \hat{H} \hat{\mathscr{U}} - \hat{\mathscr{U}}^\dagger \hat{H} \hat{\mathscr{A}}_S \hat{\mathscr{U}}\right]$$

海森堡运动方程

我们已经约定 $\hat{H}$ 不显含时间 t. 此约定意味着,

$$\hat{\mathscr{U}} = \exp\left[\frac{-i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right], \quad \hat{\mathscr{U}}^\dagger = \exp\left[\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right], \quad \left[\hat{H}, \hat{\mathscr{U}}\right] = \left[\hat{H}, \hat{\mathscr{U}}^\dagger\right] = 0$$

所以,

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathscr{A}}_H(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\mathscr{U}}^\dagger\hat{\mathscr{A}}_S\hat{\mathscr{U}}\,\hat{H} - \hat{H}\,\hat{\mathscr{U}}^\dagger\hat{\mathscr{A}}_S\hat{\mathscr{U}}\right]$$

亦即:

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\hat{\mathscr{A}}_H(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\mathscr{A}}_H(t),\ \hat{H}\right]}$$

此式称为海森堡运动方程, 它在海森堡绘景中的地位与薛定谔绘景中态矢量满足的含时薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle_S = \hat{H}|\Psi(t)\rangle_S$$

相当.

海森堡运动方程解题举例

1. 试用海森堡运动方程研究在 x 轴上运动的一维自由粒子.

既然要使用海森堡运动方程, 我们必然采取的是海森堡绘景. 为书写方便计, 以下省略声明海森堡绘景的脚标 H. 量子力学中的一维自由粒子由如下哈密顿算符定义:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu}$$

- 粒子动量的运动方程为,

  $$\frac{\mathrm{d}\hat{p}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p},\ \hat{H}] = 0$$

  即粒子的动量算符不随时间演化:

  $$\hat{p}(t) = \hat{p}(0)$$

  式中的 $\hat{p}(0)$ 可视为 $t=0$ 时刻的动量算符, 它实际上是自由粒子的一个守恒量算符.

- 粒子位置坐标的运动方程为,

$$\frac{\mathrm{d}\hat{x}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{x},\ \hat{H}] = \frac{\hat{p}(0)}{\mu}$$

其解是:

$$\boxed{\hat{x}(t) = \hat{x}(0) + \frac{\hat{p}(0)}{\mu}t}$$

虽然这个结果与经典自由质点的运动方程 $x(t) = x_0 + vt$ 很相似,但二者有一个本质的差别,即量子力学自由粒子在不同时刻的位置坐标算符彼此不对易

$$[\hat{x}(0), \hat{x}(t)] = \frac{i\hbar t}{\mu}$$

进而有如下不确定关系,

$$\Delta x(t)\ \Delta x(0) \geqslant \frac{\hbar t}{2\mu}$$

换言之,即使我们在自由粒子演化的初始时刻将其精确定位,随着时间的推移,粒子位置坐标的误差也会越来越大. 这个图像对应的正是微观粒子的波动性.

专题：

对于两个相互等价的波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 与 $\psi'(\vec{r}, t) = e^{i\alpha}\,\psi(\vec{r}, t)$ 而言，相因子 α 是否可以是粒子空间位置坐标和时间参数的函数，$\alpha = \alpha(\vec{r}, t)$？

分析：

即使 $\alpha = \alpha(\vec{r}, t)$，下式总是成立的：

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi'(\vec{r}, t)|^2$$

所以，按照 Born 的概率诠释，$\psi'(\vec{r}, t)$ 确实有资格与 $\psi(\vec{r}, t)$ 描写同一个量子态． 不过，倘若 $\psi(\vec{r}, t)$ 是 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + V(\vec{r}, t)\,\psi$$

的解，则 $\psi' = e^{i\alpha}\psi$ 在一般情形下并不是 Schrödinger 方程的解 (除非 α 为常数)．

事实上，注意到 $\psi = e^{-i\alpha}\psi'$，我们有：

$$\begin{aligned}
\partial_t\psi &= e^{-i\alpha}\left[\partial_t\psi' - i(\partial_t\alpha)\,\psi'\right] \\
\nabla\psi &= e^{-i\alpha}\left[\nabla\psi' - i(\nabla\alpha)\,\psi'\right] \\
\nabla^2\psi &= e^{-i\alpha}\left[\nabla^2\psi' - 2i(\nabla\alpha)\cdot\nabla\psi' - (\nabla\alpha)^2\psi' - i(\nabla^2\alpha)\,\psi'\right]
\end{aligned}$$

把此处一、三两个表达式代入到前页 ψ 所服从的 Schrödinger 方程中，可知：

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = &-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi' + V(\vec{r},t)\,\psi' \\
&-\hbar(\partial_t\alpha)\psi' + \frac{i\hbar^2}{\mu}(\nabla\alpha)\cdot\nabla\psi' + \frac{\hbar^2}{2\mu}(\nabla\alpha)^2\psi' \\
&+\frac{i\hbar^2}{2\mu}(\nabla^2\alpha)\psi'
\end{aligned}$$

由于相因子 α 相关项的存在，ψ' 服从的方程不再是 Schrödinger 方程．既如此，概率诠释所赋予的等价性 $\psi' \sim \psi$ 是否作废了？

然而事情并没有如此简单. 前面已经指出, 如下形式的薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + V(\vec{r},t)\,\psi$$

具有明显的局限性:

1. 它仅仅适用于保守力体系. 对于处于非保守力场中的粒子而言, 势场 $V(\vec{r},t)$ 的物理意义不明确.
2. 它也不适于描写具有非零内禀自旋的粒子的运动.

鉴于此, Dirac 建议: 量子力学体系波函数随时间演化的一般规律应推广为[7],

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\,\psi$$

这里 $\hat{H}$ 是体系的 Hamilton 算符. 对于这个普遍形式的薛定谔方程, 有理由相信概率诠释所暗示的等价性 $\psi \sim \psi' = \psi e^{i\alpha}$ 可以得到保证.

---

[7]此式习惯上也称为薛定谔方程.

下面让我们颠倒逻辑，尝试从波函数的等价性 $\psi \sim \psi' = \psi e^{i\alpha}$ 出发来建立一类量子力学体系合格的 Hamilton 算符.

从前面的分析可知，原始形式薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + V(\vec{r}, t)\,\psi$$

情形下波函数等价性 $\psi \sim \psi' = \psi e^{i\alpha}$ 失效的原因在于

$$\partial_t\psi = e^{-i\alpha}\partial_t\psi' - i(\partial_t\alpha)e^{-i\alpha}\,\psi', \quad \nabla\psi = e^{-i\alpha}\nabla\psi' - i(\nabla\alpha)e^{-i\alpha}\,\psi'$$

1. 倘若此两式可以变为：

$$\partial_t\psi = e^{-i\alpha}\partial_t\psi', \quad \nabla\psi = e^{-i\alpha}\nabla\psi'$$

   则 ψ 与 $\psi' = \psi e^{i\alpha}$ 满足相同的时间演化方程，如此即有等价性 $\psi' \sim \psi$. 但是，这两式在 $\alpha = \alpha(\vec{r}, t)$ 的前提下显然是不可能成立的.

为了保证 $\psi \sim \psi' = \psi e^{i\alpha}$，现尝试把作用于波函数的普通时空导数替换为相应的协变导数：

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightsquigarrow D_t = \frac{\partial}{\partial t} + i\varphi(\vec{r}, t), \qquad \nabla \rightsquigarrow \vec{D} = \nabla - i\vec{A}(\vec{r}, t)$$

式中的 $\varphi(\vec{r}, t)$ 和 $\vec{A}(\vec{r}, t)$ 是描写一类相互作用的经典场[8]. 要求在 $\psi \to \psi' = \psi e^{i\alpha}$ 的同时，

$$\varphi \to \varphi', \quad D_t \to D_t' = \frac{\partial}{\partial t} + i\varphi',$$
$$\vec{A} \to \vec{A}', \quad \vec{D} \to \vec{D}' = \nabla - i\vec{A}'$$

且：

$$D_t\psi = e^{-i\alpha} D_t'\psi', \quad \vec{D}\psi = e^{-i\alpha}\vec{D}'\psi'$$

则不难看出：

$$\varphi' = \varphi - \frac{\partial\alpha}{\partial t}, \quad \vec{A}' = \vec{A} + \nabla\alpha$$

[8] 请问：$(\vec{A}, \varphi)$ 精确的物理意义是什么？

以及,

$$
\begin{aligned}
\vec{D}^2\psi &= \vec{D}\cdot\vec{D}\psi = \vec{D}\cdot\left(e^{-i\alpha}\vec{D}'\psi'\right) \\
&= (\nabla - i\vec{A})\cdot\left(e^{-i\alpha}\vec{D}'\psi'\right) \\
&= e^{-i\alpha}\nabla\cdot\vec{D}'\psi' + \left(\nabla e^{-i\alpha} - ie^{-i\alpha}\vec{A}\right)\cdot\vec{D}'\psi' \\
&= e^{-i\alpha}(\nabla - i\nabla\alpha - i\vec{A})\cdot\vec{D}'\psi' \\
&= e^{-i\alpha}(\nabla - i\vec{A}')\cdot\vec{D}'\psi' = e^{-i\alpha}\vec{D}'\cdot\vec{D}'\psi' = e^{-i\alpha}\vec{D}'^2\psi'
\end{aligned}
$$

所以,把原始的薛定谔方程

$$
i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + V(\vec{r},t)\,\psi
$$

修正为:

$$
i\hbar D_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{D}^2\psi, \qquad \rightsquigarrow \quad i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\nabla - i\vec{A})^2\psi + \hbar\varphi\psi
$$

就可保证波函数 ψ 与 $\psi' = \psi e^{i\alpha}$ 的等价性.

点评:

1. 变换式

$$\psi \rightsquigarrow \psi' = \psi e^{i\alpha}, \quad \vec{A} \rightsquigarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla\alpha, \quad \varphi \rightsquigarrow \varphi' = \varphi - \frac{\partial\alpha}{\partial t}$$

的数学形式提示我们, $(\vec{A}, \varphi)$ 可以解释为电磁场的规范势.

2. $\psi \rightsquigarrow \psi' = \psi e^{i\alpha}$ 称为波函数的规范变换[9], 选择 $\alpha(\vec{r}, t)$ 相当于选取规范.

3. 要求量子力学理论具有局域规范变换下的对称性使得我们写出了外电磁场中带电粒子体系的 Hamilton 算符:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\nabla - i\vec{A})^2 + \hbar\varphi$$

这一见解是杨振宁先生对于现代物理学最杰出的贡献: 规范对称性决定基本相互作用力.

[9] 相因子 $\alpha = \alpha(\vec{r}, t)$ 时的规范变换称为局域规范变换.

1. 在电磁场 $(\vec{A}, \varphi)$ 中，带电粒子的物理动量为 $\vec{p} = m\vec{v}$，而

$$\vec{\mathcal{P}} = m\vec{v} - \hbar\vec{A}$$

是其正则动量. 正则量子化程序正是把正则动量算符化:

$$\vec{\mathcal{P}} \quad \rightsquigarrow \hat{\vec{\mathcal{P}}} = -i\hbar\nabla$$

需要强调的是，带电粒子物理动量的本征值、分布概率与平均值均是与规范选择无关的物理量.

2. 倘若存在标量函数 $\alpha(\vec{r}, t)$ 使得电磁势可以表达为:

$$\vec{A} = -\nabla\alpha, \quad \varphi = \frac{\partial\alpha}{\partial t}$$

这样的电磁场称为纯规范，实际上是不存在的. 完全可以通过规范变换

$$\psi \rightsquigarrow \psi' = \psi e^{i\alpha}, \quad \vec{A} \rightsquigarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla\alpha, \quad \varphi \rightsquigarrow \varphi' = \varphi - \frac{\partial\alpha}{\partial t}$$

让纯规范从理论中消除[10].

[10] 在此规范变换定义的新规范里，$\vec{A}' = \varphi' = 0$.

顿悟:

坚持波函数的概率诠释,必然要求波函数具有局域规范变换

$$\psi(\vec{r},t) \quad \to \quad \tilde{\psi}(\vec{r},t) = \psi(\vec{r},t)\exp[i\alpha(\vec{r},t)]$$

下的物理等价性、薛定谔方程必须具有局域规范变换下的不变性. 因此,

1. 量子力学研究的微观粒子必然参与某种规范相互作用、例如电磁相互作用. 换句话说,此微观粒子必然携带着某种规范场的荷[11].
2. 从量子力学第一原理的视角看,出现在薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\vec{r},t)$$

中的 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 必定包含规范场的规范势 $(\vec{A},\varphi)$ 的贡献.

[11] 例如电荷.

Q: 怎样看待原版的薛定谔方程

$$i\hbar\partial_t\Psi(\vec{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\vec{r},t)\right]\Psi(\vec{r},t)$$

在波函数局域规范变换 $\Psi(\vec{r},t)\to\tilde{\Psi}(\vec{r},t)=\Psi(\vec{r},t)\exp[i\alpha(\vec{r},t)]$ 的非不变性?

1. 把 $V(\vec{r},t)$ 理解为粒子与外界之间相互作用的有效势能、从而把原版的薛定谔方程仅仅看作一个唯象方程，不承认它量子力学理论基本方程的地位.
2. 或者把原版的薛定谔方程看作是修正版的薛定谔方程

$$i\hbar\partial_t\Psi(\vec{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\nabla-i\vec{A})^2+\hbar\varphi\right]\Psi(\vec{r},t)$$

在某个特定规范里的有效形式. 鉴于规范已经取定，自然可以期望：

$$\Psi(\vec{r},t)\not\to\tilde{\Psi}(\vec{r},t)=\Psi(\vec{r},t)\exp[i\alpha(\vec{r},t)]$$