9.电磁场规范不改变薛定谔方程

符合直觉的是，电磁场规范变换下波函数发生变换，但是新表象的波函数当然是符合薛定谔方程的，但我们需要证明一下，也就是要证明规范变换下也满足方程

$$i\hbar\frac{\partial|\alpha'\rangle}{\partial t}=H'|\alpha'\rangle$$

我们考虑在坐标表象下进行证明：$\langle x'|\alpha'\rangle=\langle x'|g|\alpha\rangle=e^{\frac{iq\Lambda(x',t)}{\hbar c}}\psi_\alpha(x')$

即此时的薛定谔方程是

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{\alpha'}(x',t)}{\partial t}=H'\psi_{\alpha'}(x',t)=H'e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}\psi_\alpha(x,t)$$

这里注意一下标记，打了撇的α是新表象，没打撇的是旧表象，二者都要被展开到坐标表象x'里。

对左边时间偏导链式法则，注意Λ也是含时的，可以得到：

$$i\hbar\left(\frac{iq}{\hbar c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\right)e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}\psi_\alpha(x',t)+i\hbar e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial t}$$

下面在考虑式子右边哈密顿算符对波函数的作用之前，我们考虑机械动量的作用，这是有益的，因为哈密顿算符比这复杂多了，我们打算由简入繁：

$$\begin{aligned}&(-i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\vec{A}')(e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}\psi_\alpha)\\&=(-i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\vec{A}-\frac{q}{c}\nabla\Lambda)(e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}\psi_\alpha)\\&=(\frac{q}{c}\nabla\Lambda)\psi_{\alpha'}+e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}(-i\hbar\nabla)\psi_\alpha-(\frac{q\vec{A}}{c})\psi_{\alpha'}-(\frac{q}{c}\nabla\Lambda)\psi_{\alpha'}\\&=e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}(-i\hbar\nabla-\frac{q\vec{A}}{c})\psi_\alpha\end{aligned}$$

上面第二行代入了规范变换的定义，第三行链式法则展开，其中一二项都是源于坐标偏导，第三第四项乘出来了没动，此时发现有两项可以抵消，于是得到第四行。我们发现这个式子似乎结果就是，如果把$g=e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}$看作一个相位因子，那么就是把这个提到算符前面了而已，因此我们可以大胆猜测，机械动量算符的平方作用于波函数，结果是小括号变为平方而已，实际上确实是这样，因此就不证了，我们直接给结论

$$(-i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\vec{A}')^2(e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}\psi_\alpha)=e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}(-i\hbar\nabla-\frac{q\vec{A}}{c})^2\psi_\alpha$$

那么要考虑哈密顿算符对波函数的作用，上面已经求了很重要的机械动量平方部分，下面我们看看标矢部分会变成怎样

$$q\phi'\psi_{\alpha'}=q(\phi-\frac{\partial\Lambda}{c\partial t})\left[e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}\psi_\alpha\right]=e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}q(\phi-\frac{\partial\Lambda}{c\partial t})\psi_\alpha$$

其中也是，先用了新旧标势的定义，然后显然标势不会作用于相位因子，直接把g提前即可，那么我们的哈密顿算符的作用就写出来了

$$H'\psi_{\alpha'}=e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}\left[(-i\hbar\nabla-\frac{q\vec{A}}{c})^2+q\phi\right]\psi_\alpha-\frac{q}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\psi_{\alpha'}$$

这是薛定谔方程的右边，这该如何跟一开始给出的薛定谔方程左边时间部分相等呢？答案是借助一下规范变换旧表象的薛定谔方程，其定义是：

$$i\hbar\frac{\partial\psi_\alpha(x',t)}{\partial t}=H\psi_\alpha(x',t)$$

这里的α是没打撇的，这个式子可以对新薛定谔方程的项进行替换，于是替换结果

$$H'\psi_{\alpha'}=i\hbar e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial t}-\frac{q}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\psi_{\alpha'}$$

现在观察这两项，这正是之前新表象薛定谔方程左边时间求导部分的内容，于是证毕。

笔者有一个新的想法，或许我们可以不依赖于坐标表象，我们新表象的薛定谔方程，由于表象变换算符是酉算符，即幺正算符，因此可以进行单位算符的插入

$$i\hbar\frac{\partial|\alpha'\rangle}{\partial t}=i\hbar\frac{\partial(g|\alpha\rangle)}{\partial t}=H'|\alpha'\rangle=gg^\dagger H'g|\alpha\rangle$$

上面第一个等号是用了新表象的定义，第四个等号利用定义的同时插入了单位算符。这里棘手的是，算g因为Λ有关，这个玩意作为一个外场可能是跟时间相关的，因此不能直接提取，要链式法则。

$$i\hbar g\frac{\partial(|\alpha\rangle)}{\partial t}+i\hbar\frac{\partial g}{\partial t}|\alpha\rangle=gH|\alpha\rangle+i\hbar\frac{\partial g}{\partial t}|\alpha\rangle=gg^\dagger H'g|\alpha\rangle$$

第一个等号用到了旧表象的薛定谔方程定义，现在我们的目标是证明其跟最后一块内容相等我们考虑同时左乘$g^\dagger$，就是要证明

$$H|\alpha\rangle + g^\dagger i\hbar\frac{\partial g}{\partial t}|\alpha\rangle = g^\dagger H' g|\alpha\rangle$$

由于要对于任意的$|\alpha\rangle$使得式子成立，因此等式左边两侧的算符是相同的，也就是要证明算符等式

$$H + g^\dagger i\hbar\frac{\partial g}{\partial t} = g^\dagger H' g$$

后续应该就是按部就班的了，因为哈密顿算符跟g的对易关系上一节求过，也用过好多次，因此结论肯定是得证，具体过程会不会卡壳，笔者就懒得想了。

作业二

好吧上面这个不依赖于坐标表象进行证明居然是一道作业题，本来笔者懒得算了，这下不得不算了。

首先当然是把这跟时间求导部分拆了，不好看；由于g求导出来会出来常数，又因为其是幺正算符，因此固然可以推导出如下的结果。

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \frac{iq}{\hbar c}\frac{\partial \Lambda}{\partial t}g \implies g^\dagger\frac{\partial g}{\partial t} = \frac{iq}{\hbar c}\frac{\partial \Lambda}{\partial t}.$$

于是原方程化简为：

$$H - \frac{q}{c}\frac{\partial \Lambda}{\partial t} = g^\dagger H' g$$

下一面我们很自然的想到展开等式右边的新哈密顿算符

$$g^\dagger H' g = g^\dagger\left(\frac{1}{2m}\Pi^2 + q\phi'\right)g = g^\dagger\left(\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}'\right)^2 + q\phi'\right)g$$

我们似乎不是很好处理上面的算符，因为机械动量算符是平方，尽管原则上可以慢慢求出来跟g的对易关系，直接大力出奇迹，把里边的平方展开，慢慢处理对易关系就行,但是有没有更简单的办法呢，答案是有的，利用上一节的一个结论，机械动量的测量期望值在新旧表象下不变，其表示为

$$\langle\alpha|\Pi|\alpha\rangle = \langle\alpha|g^\dagger\Pi' g|\alpha\rangle \implies \Pi = g^\dagger\Pi' g \implies g\Pi g^\dagger = \Pi'$$

那么新表象哈密顿就满足如下推导

$$
\begin{aligned}
H' &= \frac{1}{2m}(\mathbf{\Pi}')^2 + q\phi' \\
&= \frac{1}{2m}(g\mathbf{\Pi}g^\dagger)^2 + q\left(\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\right) \\
&= \frac{1}{2m}(g\mathbf{\Pi}g^\dagger)^2 + q\phi - \frac{q}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t} \\
&= \frac{1}{2m}g\mathbf{\Pi}g^\dagger g\mathbf{\Pi}g^\dagger + q\phi - \frac{q}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t} \\
&= g\left(\frac{1}{2m}\mathbf{\Pi}^2 + q\phi\right)g^\dagger - \frac{q}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t} \\
&= gHg^\dagger - \frac{q}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}.
\end{aligned}
$$

第一行是新哈密顿定义，第二行用了机械动量的表象变换，第三行拆了个括号，第四行把平方拆开，随后利用幺正算符性质得到第五行。此时发现第五行正可以利用旧哈密顿的定义。观察这跟式子，这跟我们要证明的式子一模一样，于是原式证毕。

值得注意的是，有些同学们发现，哈密顿算符本征值是能量，那么能量在新旧表象下的期望值当然是不变的啊，也就是自然满足

$$
\langle\alpha|H|\alpha\rangle = \langle\alpha|g^\dagger H' g|\alpha\rangle
$$

可是这是不对的，因为上面我们已经证明的结论是

$$
\langle\alpha'|H'|\alpha'\rangle = \langle\alpha|g^\dagger H' g|\alpha\rangle = \langle\alpha|H|\alpha\rangle - \frac{q}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}.
$$

不难发现差了一个时间偏导。固然只有一个结论是正确的，那么哪个对了哪个错了，又是为什么呢？显然我们作业需要证明的是正确的，但是为什么能量的期望要相差一个时间偏导呢？而这个时间偏导还偏偏依赖于时间，为什么呢？

这个可以这么理解，Λ随时间变化，相当于系统处于一个随时间变化的“电磁参考系”中。这种参考系的改变当然会导致能量的表观变化，因为就像规定标势零点不一样，那么自然电势能不一样了，这类似于经典力学中非惯性参考系引入的惯性力，如果没有考虑到惯性力，那么系统能量就会发生变化，为了考虑惯性力的作用，就相当于在上面的电磁场能量期望值中引入了Λ时间偏导来保证能量守恒。

后面在第十二节，会提到规范变换的Λ相当于对标势的零点进行变换。因此这个上述的想法确实是比较合理的解释。

10.规范变换下几率密度流不变

显然，波函数的概率密度$|\rho|^2=|\rho'|^2$在规范变换下是不变的，因为波函数只是相位改变了而已

那么$\vec{j}=\frac{1}{2\mu}(\psi_\alpha^*\vec{p}\psi_\alpha+\psi_\alpha\vec{p}\psi_\alpha^*)$(这里写成机械动量算符的形式会好一些) 会在规范变换下改变吗?

为了证明，首先我们把波函数改写成幅角和模的形式$\psi_\alpha=\rho^{\frac{1}{2}}e^{\frac{iS}{\hbar}}$
这样的好处是，规范变换下的波函数由于模是一样的，仅有相位不一样，因此上面波函数的差异就可以用S来描述了，就不用算符g了。那么这种表示下

$$\vec{j}=\frac{1}{2\mu}\left[\psi_\alpha^*(-i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\vec{A})\psi_\alpha+\psi_\alpha(i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\vec{A})\psi_\alpha^*\right]=\frac{\rho}{\mu}(\nabla S-\frac{q\vec{A}}{c})$$

上面这个式子等号怎么来的呢，其实本质上是大力出奇迹，直接把波函数幅角模的定义丢进去，注意链式法则。

$$\begin{aligned}\vec{j}=&\frac{1}{2\mu}\left[\rho^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{iS}{\hbar}}\left(-i\hbar(\nabla\rho^{\frac{1}{2}})e^{\frac{iS}{\hbar}}+\rho^{\frac{1}{2}}e^{\frac{iS}{\hbar}}\nabla S-\frac{q}{c}\vec{A}(\rho^{\frac{1}{2}}e^{\frac{iS}{\hbar}})\right)\right.\\&\left.+\rho^{\frac{1}{2}}e^{\frac{iS}{\hbar}}\left(i\hbar(\nabla\rho^{\frac{1}{2}})e^{-\frac{iS}{\hbar}}-\rho^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{iS}{\hbar}}\nabla S-\frac{q}{c}\vec{A}(\rho^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{iS}{\hbar}})\right)\right]\\&=\frac{1}{2\mu}\left[2\rho\nabla S-2\frac{q}{c}\rho\vec{A}\right]\\&=\frac{\rho}{\mu}(\nabla S-\frac{q}{c}\vec{A})\end{aligned}$$

上面链式法则抵消掉了$\nabla\rho^{\frac{1}{2}}$的项，而因为相位带了一个i导致相减变为相加合并了，然后标势部分直接合并即可，就得到了最终结果。那么假设我们现在进行规范变换，那么新表象的几率密度流，显然其中的$S,\vec{A}$的定义是发生变换的，那么$\vec{j}'$表示为

$$\vec{j}'=\frac{\rho}{\mu}(\nabla S+\frac{q}{c}\nabla\Lambda-\frac{q\nabla\Lambda}{c}-\frac{q\vec{A}}{c})=\vec{j}$$

这里S相位，源于$|\psi_{\alpha'}|=|e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}\psi_\alpha|$的相位因此多出来一项(第二项)，然后又因为规范变换$\vec{A}\to\vec{A}+\nabla\Lambda$又多出来一项（第三项)，然后发现两个抵消掉了，因此就证明了几率密度流不变。

还有一种证法是从坐标表象出发的，仍然将$|\alpha\rangle\to|\alpha'\rangle$看作$g=e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}$相位变换，那么$\langle x\rangle=\langle\alpha|\vec{x}|\alpha\rangle=\langle\alpha'|\vec{x}|\alpha'\rangle$的成立是基于测量原理的，但是回过头来我们可以稍微在坐标表象进一步验证一

下

$$\langle\alpha'|\vec{x}|\alpha'\rangle = \int d^3x'\ \psi^*_{\alpha'}(x')x'\psi_{\alpha'}(x') = \int d^3x'\ \psi_{\alpha}(x')x'\psi_{\alpha}(x') = \langle\alpha|\vec{x}|\alpha\rangle$$

其中最中间的等号直接把相位提取出来，由于坐标算符不影响相位，因此相位$e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}e^{-\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}$直接抵消了。于是证毕。

但上面这个不是关键，关键的是下面这个，机械动量的测量期望在旧表象下的坐标表象表示可以用不带撇的α波函数ψ_α表示

$$\begin{aligned}
\frac{\langle\alpha|\vec{\Pi}|\alpha\rangle}{\mu} &= \frac{1}{\mu}\int d^3x'\psi^*_\alpha(x')(\vec{p}-\frac{q\vec{A}}{c})\psi_\alpha(x') \\
&= \frac{1}{2\mu}\int d^3x'\left[\psi^*_\alpha(x')(\vec{p}-\frac{q\vec{A}}{c})\psi_\alpha(x') + \psi_\alpha(x')(\vec{p}-\frac{q\vec{A}}{c})^*\psi^*_\alpha(x')\right] \\
&= \int d^3x'\ \vec{j}
\end{aligned}$$

上面第一行用了坐标波函数的定义，这个就没啥好说的了。第二行是源于把第一行主动分为两半，因为第二行的两部分由于动量算符本身是厄密算符，因此两部分是完全等价的，只是换了个写法。但是这换一个写法，我们就发现中括号内是几率密度流的定义，就得到了第三行。也就是说，这个式子意味着几率密度流的全空间积分等于速度。由于之前说过换表象，不会影响动量测量值的改变，那么自然几率密度流是不变的了。或者倒过来，如果我们采用之前证明的结论$\vec{j}=\vec{j}'$，也可以知道$\langle\vec{\pi}\rangle=\langle\vec{\pi}'\rangle$动量期望值是不变的。

11.一种元磁荷是元电荷的倍数的证明

首先让我们回忆一下最正常的麦克斯韦方程组

$$\begin{aligned}
\nabla\cdot\vec{E} &= 4\pi\rho \\
\nabla\cdot\vec{B} &= 0 \\
\nabla\times\vec{E} &= -\frac{\partial\vec{B}}{\partial t} \\
\nabla\times\vec{B} &= \frac{4\pi}{c}\vec{j} + \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}
\end{aligned}$$

上面式子虽然正确，但是我们不难发现式子不对称，关于$\vec{E}$和$\vec{B}$不对称，不好看，因此，假设类比电荷，如果有磁荷ρ_m存在，那么：

$$
\begin{aligned}
\nabla \cdot \vec{E} &= 4\pi\rho \\
\nabla \cdot \vec{B} &= 4\pi\rho_m \\
\nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}\vec{j}_m \\
\nabla \times \vec{B} &= \frac{4\pi}{c}\vec{j} + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}
\end{aligned}
$$

忽略项正负号带来的差异，因为上课的时候老师没有具体管正负号，总之这样比较对称、好看——尽管磁荷实际不存在(迄今为止没有发现)。但是假设是存在的，那么我们可以证明$e_m = \frac{\hbar c}{2e} \cdot n$，即磁单极是电荷单位倍数。

下面开始证明：

假设某元磁荷在原点，根据定义其磁场为

$$
\vec{B} = \frac{e_m}{r^2}\hat{r} = \nabla \times \vec{A}
$$

由于磁场总是可以表示为矢势，因此我们可以想个办法找到$\vec{A} = \frac{e_m(1-\cos\theta)}{r\sin\theta}\hat{\phi}$，这个矢势场是绕$xy$面转圈的。如何找的我们可以不用管，我们先验证一下其确实可以叉乘得到旋度也就是磁场$\vec{B}$：

在球坐标下：

$$
\begin{aligned}
\nabla \times \vec{A} = &\frac{1}{r\sin\theta}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}(A_\phi \sin\theta) - \frac{\partial A_\theta}{\partial\phi}\right]\hat{r} \\
&+ \frac{1}{r}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial A_r}{\partial\phi} - \frac{\partial}{\partial r}(rA_\phi)\right]\hat{\theta} \\
&+ \frac{1}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}(rA_\theta) - \frac{\partial A_r}{\partial\theta}\right]\hat{\phi}
\end{aligned}
$$

这里很多项因为$\vec{A}$没有对应的分量立即变为0，最终计算出来就是我们要的磁场，证毕。

但是啊，我们发现了一个问题，此时考虑麦克斯韦方程组，会有

$$
\nabla \cdot \vec{B} = \nabla \cdot (\nabla \times \vec{A}) = 4\pi\rho_m
$$

可有一个数学结论是，任意一个矢量先被∇算符叉乘再点乘是必定为0的，也就是

$$
\nabla \cdot (\nabla \times \vec{A}) = 0
$$

必定成立。可是上面麦克斯韦方程组结果不是0，这是怎么回事，有矛盾？

这个原因是，实际上这里$\vec{A}$不是良函数，有奇点，在$\theta \to \pi$时，显然无穷大。我们得解决一下这个问题，于是我们定义一个新的矢势$\vec{A}^{(II)} = -\frac{e_m(1+\cos\theta)}{r\sin\theta}\hat{\phi}$，这个矢势解决了$\theta \to \pi$奇点问题，但倒过来，却在$\theta \to 0$有问题。

因此一个很自然的思路是把真实的矢势结合上两个式使用，当$\theta = \frac{\pi}{2}$时一块用，两个加起来除以二即可，当$\theta \to \pi$时用II，$\theta \to 0$时用I。

显然不出意外，两个矢势之间由规范变换练习起来，$\vec{A}^{(II)} = \vec{A}^{(I)} + \nabla\Lambda$，我们应该是可以找到$\Lambda$。

下面开始寻找，考虑矢势差：$\vec{A}^{(II)} - \vec{A}^{(I)} = \frac{-2e_m}{r\sin\theta}\hat{\phi}$

而$\nabla\Lambda = \frac{\partial\Lambda}{\partial r}\hat{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial\Lambda}{\partial\theta}\hat{\theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\Lambda}{\partial\phi}\hat{\phi}$

显然，$\Lambda = -2e_m\phi$满足需求。

于是两种规范下的波函数的变换关系为

$$\psi^{(II)} = e^{\frac{iq\Lambda}{\hbar c}}\psi^{(I)} = e^{\frac{-2iqe_m\phi}{\hbar c}}\psi^{(I)}$$

考虑波函数的单值性，以及周期边界条件必定要有绕着θ转一圈值不变：

$$\psi^{(I)}(r, \frac{\pi}{2}, 0) = \psi^{(I)}(r, \frac{\pi}{2}, 2\pi)$$

这个周期条件对$\psi^{(II)}$显然也成立，因此我们可以得到

$$\begin{aligned}
\psi^{(II)}(r, \frac{\pi}{2}, 2\pi) &= e^{\frac{-4ie_m\pi}{\hbar c}}\psi^{(I)}(r, \frac{\pi}{2}, 2\pi) \\
&= e^{\frac{-4ie_m\pi}{\hbar c}}\psi^{(I)}(r, \frac{\pi}{2}, 0) \\
&= e^{\frac{-4ie_m\pi}{\hbar c}}\psi^{(II)}(r, \frac{\pi}{2}, 0) \\
&= e^{\frac{-4ie_m\pi}{\hbar c}}\psi^{(II)}(r, \frac{\pi}{2}, 2\pi)
\end{aligned}$$

上面各个等号就是不断利用了周期条件和波函数变换而已，故有由最后一行和第一行比较，波函数要一样，那么相位必定相差整数倍的2π，即要有$\frac{2e_m}{\hbar c} = n \in \mathbb{Z}$

即$e_m = n\frac{\hbar c}{2e}$，即磁单位是电荷单位倍数。此外，这个倍数的量级很好确认，考虑精细结构常数$\frac{\hbar c}{e^2} \sim 137$，则$e_m = \frac{\hbar c}{e^2} \cdot \frac{ne}{2} = 137 \cdot \frac{ne}{2}$也就是大概七十倍的量级。