

$$K(x''t'', x't') = \int_{(x', t')}^{(x'', t'')} D[p(t)] D[x(t)] \exp \left\{ \sum_{j=1}^N \left[\frac{-i\epsilon}{2m\hbar} p_j^2 + \frac{i}{\hbar} p_j (x_j - x_{j-1}) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x_{j-1}) \right] \right\} \quad (4.5.17)$$

式中

$$\int_{(x', t')}^{(x'', t'')} D[p(t)] D[x(t)] = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right)^{2N} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{j=1}^N \prod_{k=1}^{N-1} dp_j dx_k \quad (4.5.18)$$

当 $N \rightarrow \infty, \epsilon \rightarrow 0$ 时, $x_j - x_{j-1} \approx \dot{x}_j \epsilon$, 因而, 式(4.5.17)可化为

$$\begin{aligned} K(x''t'', x't') &= \int D[p] D[x] \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} [p\dot{x} - H(x, p)] dt \right\} \\ &= \int D[p] D[x] \cdot \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t''} L(x, \dot{x}) dt \right] \end{aligned} \quad (4.5.19)$$

此即相空间中的路径积分来计算传播子。

4.6 AB(Aharonov-Bohm)效应

在经典电动力学中,电磁矢势和标势只是作为描述和计算电磁场强度的一个方便的数学工具而引进的. 诚然,在经典力学的 Hamilton 正则形式和 Lagrange 理论形式中,对于荷电粒子的描述,的确要出现矢势和标势. 但在荷电粒子的基本动力学方程中

$$m \frac{d}{dt} \mathbf{v} = \left(q\mathbf{E} + \frac{q}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) \quad (4.6.1)$$

只有粒子所在地域(local)的电场强度 $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ 和磁场强度 $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ 出现,而矢势和标势并不出现.

与此不同,量子力学中(无论是 Schrödinger 波动力学形式, Heisenberg 矩阵力学形式,或者 Feynman 路径积分形式),描述荷电粒子在电磁场中的动力学方程中都会出现粒子所在地域的矢势 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ 和标势 $\varphi(\mathbf{r}, t)$. Aharonov 和 Bohm^① 首先认识到电磁矢势和标势的深刻的物理含义. 他们指出,在电磁场强度为 0 的区域中(但矢势和标势并不为 0)运动的两束相干的荷电粒子,波函数会发生不同的相位变化. 因此,当两束粒子重新会聚后,就会出现干涉现象. 不久,果然在实验中观测到了这种干涉现象^②. 后来人们称之为 AB 效应^③. Furry 和 Ramsey^④ 还从量子力

① Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.*, **115**(1959), 485.

② R. G. Chambers, *Phys. Rev. Lett.*, **5**(1960), 1.

③ 例如, M. Peskin and A. Tonomura, The Aharonov-Bohm effect, *Lecture Notes in Physics*, vol. **340**, Springer-Verlag, Berlin, 1989.

④ W. H. Furry and N. F. Ramsey, *Phys. Rev.*, **118**(1960), 623.

学理论本身的自洽性来论证了 AB 效应的正确性. 下面简单介绍一下两种形式的 AB 效应, 即磁 AB 效应和电 AB 效应.

Feynman 的路径积分理论已被广泛应用来处理各种物理现象, 如 AB 效应、量子 Hall 效应等. 作为路径积分理论的一个重要应用, 下面用路径积分理论来分析 AB 效应. 先讨论磁 AB 效应.

磁 AB 效应实验的示意图, 如图 4.8 所示. 它实质上是一个双缝干涉实验. 与通常双缝干涉实验不同之处, 仅在于双缝装置的后面(图中斜线所示区域)安放一条很细的长螺管, 管内部有磁场 $\mathbf{B} \neq 0$, 垂直纸面向上. 在螺管外面有矢势 \mathbf{A} (采用 Coulomb 规范), 如图中圆圈所示.

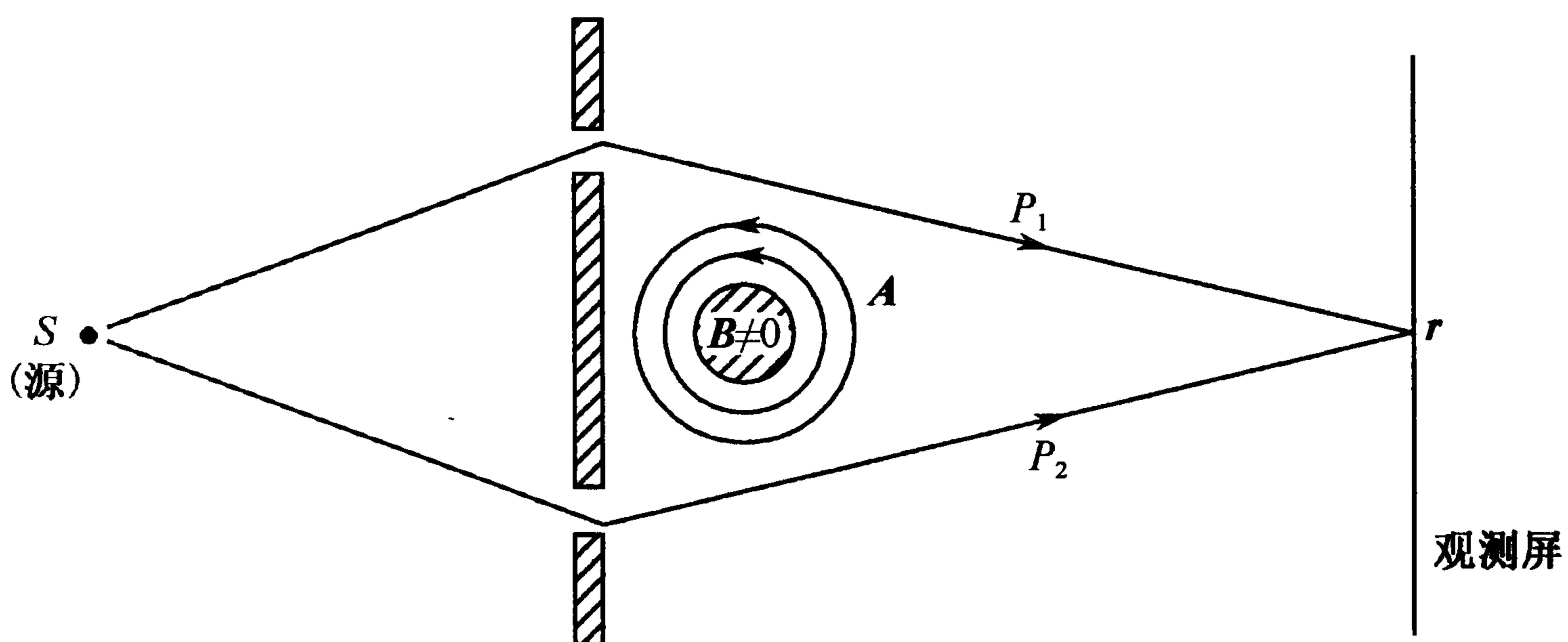


图 4.8 磁 AB 效应示意图

取自 Shankar 的教材^①.

在通常的双缝干涉实验中, 粒子从源 S 发出后, 经过双缝后, 在屏上会合, 会观测到干涉现象. 按照路径积分理论 4.2 节, 描述双缝干涉的波函数为

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \psi_{P_1}(\mathbf{r}) + \psi_{P_2}(\mathbf{r}) \quad (4.6.2)$$

ψ_{P_1} 和 ψ_{P_2} 分别是经历路径 P_1 和 P_2 的贡献.

下面来讨论磁 AB 效应(图 4.8)^①. 按照路径积分理论, 由于 Lagrange 量 L 中的 $(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A})$ 项[书末附录 A.1, 式(A.1.11)], 沿每一条路径上的波函数将出现一个额外的因子

$$\exp\left[\frac{iq}{\hbar c} \int_{t_0}^t (\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}) dt'\right] = \exp\left(\frac{iq}{\hbar c} \int_S^r \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}'\right) \quad (4.6.3)$$

因此描述磁 AB 效应(图 4.8)的波函数为

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \psi_{P_1}(\mathbf{r}) \exp\left(\frac{iq}{\hbar c} \int_{P_1} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}'\right) + \psi_{P_2}(\mathbf{r}) \exp\left(\frac{iq}{\hbar c} \int_{P_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}'\right) \quad (4.6.4)$$

把右侧两项的一个共同因子提出后, 上式可改写成

^① R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*, 2nd. ed., p. 497~499; K. Gottfried and T. M. Yan, *Quantum Mechanics. Fundamentals*, 2nd. ed., p. 196~198.

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}) &\approx (\text{共同因子}) \left[\psi_{P_1}(\mathbf{r}) + \psi_{P_2}(\mathbf{r}) \exp\left(\frac{iq}{\hbar c} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}'\right) \right] \\ &= (\text{共同因子}) \left[\psi_{P_1}(\mathbf{r}) + \psi_{P_2}(\mathbf{r}) \exp\left(\frac{iq\Phi}{\hbar c}\right) \right]\end{aligned}\quad (4.6.5)$$

式中

$$\Phi = \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}' = \int (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{s} = \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} \quad (4.6.6)$$

是通过细螺管的磁通. 在磁 AB 效应中, 由于细螺管内磁场 \mathbf{B} 的存在, 通过 P_1 和 P_2 两条路径的波函数有一个相差, $\delta\phi = q\Phi/\hbar c$. 在一般情况下, 其干涉花样将不同于通常的双缝干涉, 这一点已为实验所证实.

磁 AB 效应实验表明, 在粒子所经历的路径 P_1 和 P_2 上及它们邻域(处于细螺管外)中, $\mathbf{B}=0$, 但 $\mathbf{A} \neq 0$. 由于矢势 \mathbf{A} 的存在, 双缝干涉花样将不同于通常的双缝干涉花样, 在实验上是可以观测的, 所以矢势 \mathbf{A} 是有物理意义的. 但应强调, 尽管矢势 \mathbf{A} 是与规范有关, 但实验观测到的双缝干涉花样的变化, 只依赖于螺管内的磁通 Φ , 它不依赖于所取规范.

注意: 当细螺管内的磁通 Φ 满足条件 $q\Phi/(\hbar c) = 2n\pi$ (n 整数) 时, 双缝干涉花样就与平常的双缝干涉实验中的观测结果相同. 换言之, 当磁通

$$\Phi = n\Phi_0, \quad \Phi_0 = 2\pi\hbar c/q = 4.14 \times 10^{-7} \text{Gs} \cdot \text{cm}^2 \quad (4.6.7)$$

就会出现上述现象. Φ_0 称为磁通量子(flux quantum). 随磁通 Φ 的变化, 相差 $\delta\phi$ (因而双缝干涉花样) 也随之变化. 磁通变化的周期为 $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/q$, 这已在实验中观测到. 关于磁 AB 效应的更深刻的物理含义, 可参阅 Aharonov-Bohm 的原始文献和有关的评述性文献^①.

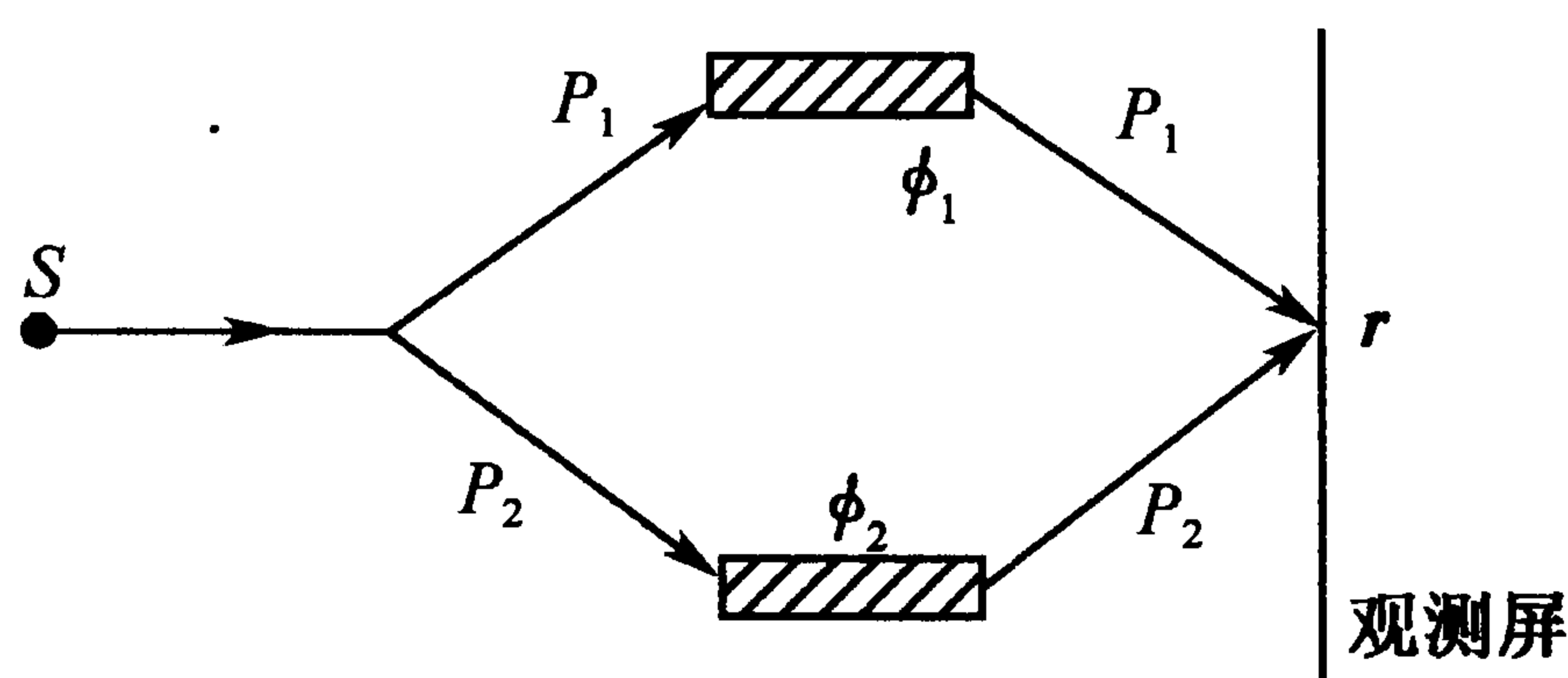


图 4.9 电 AB 效应

其次用路径积分理论来分析电 AB 效应, 如示意图 4.9 所示. 设入射荷电 q 的粒子束经过双缝后, 分别经历两条路径 P_1 和 P_2 , 然后在观测屏汇集. 在粒子经历的两条路径上, 分别放置两个 Faraday 筒(空心金属圆柱形筒, 筒内无电场), 筒上

^① 例如, M. P. Silverman, *Am. J. Phys.* **61**(1993), No. 6, p. 514~523; Y. Aharonov and D. Rohrlich, *Quantum Paradoxes*, § 4.4 (Wiley-VCH).

* 1Gs = 10^{-4} T

静电势分别为 ϕ_1 和 ϕ_2 , 电势差为 $\Delta\phi = \phi_2 - \phi_1$. 由于荷电粒子经历的路径上有静电势 ϕ 的存在, Lagrange 量 L 中出现一项 $-q\phi$ [见书末附录 A. 1, 式(A. 1. 11)], 波函数中将出现一个因子 $\exp\left(-\frac{iq}{\hbar}\int^t \phi dt\right)$. 设荷电粒子通过 Faraday 筒所需时间为 τ , 则经历两条路径的荷电粒子的波函数有一个相差

$$\delta = \frac{q\tau}{\hbar} \Delta\phi \quad (4.6.8)$$

由于技术上的困难, 这种电 AB 效应尚未在实验上观测到.

附录 规范不变性

1. 经典力学中的规范不变性

在经典电动力学中, 电磁场矢势 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ 与标势 $\varphi(\mathbf{r}, t)$ 如作以下变换:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &\rightarrow \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla f(\mathbf{r}, t) \\ \varphi(\mathbf{r}, t) &\rightarrow \varphi'(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (1)$$

式中 $f(\mathbf{r}, t)$ 是任意的非奇异函数, 电磁场强度

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\nabla\varphi - \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A} \\ \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A} \end{aligned} \quad (2)$$

显然保持不变, 此即电磁场的规范不变性.

以下考虑荷电 q 、质量为 M 的粒子在电磁场中的运动.

1) Newton 力学形式

在 Newton 方程中

$$M \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r} = q \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) \quad (3)$$

只出现 \mathbf{E} 和 \mathbf{B} , 其规范不变性是很明显的.

2) Lagrange 力学形式

荷电粒子的 Lagrange 量为

$$L(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \frac{1}{2} M v^2 - q \left[\varphi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right] \quad (4)$$

\mathbf{A} 与 φ 出现在 L 中, 所以 L 与规范有关. 但把 L 代入 Lagrange 方程

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} \right) = 0 \quad (5)$$

可得出

$$\frac{d}{dt} \left[M\mathbf{v} + \frac{q}{c} \mathbf{A} \right] = -q\nabla\varphi + \frac{q}{c} \nabla(\mathbf{v} \cdot \mathbf{A})$$

利用

$$\frac{d}{dt} \mathbf{A} = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A}$$

$$\nabla(v \cdot \mathbf{A}) = v \times (\nabla \times \mathbf{A}) + (v \cdot \nabla)\mathbf{A} = v \times \mathbf{B} + (v \cdot \nabla)\mathbf{A}$$

可得

$$M \frac{d}{dt}v = q \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c}v \times \mathbf{B} \right) \quad (6)$$

与式(3)相同,也与规范无关.

3) Hamilton 力学形式

粒子运动状态用正则坐标 $\mathbf{r}(t)$ 和正则动量 $\mathbf{p}(t)$ 描述. 正则动量定义为

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = M\mathbf{v} + \frac{q}{c}\mathbf{A} = \boldsymbol{\pi} + \frac{q}{c}\mathbf{A} \quad (7)$$

$\boldsymbol{\pi} = M\mathbf{v}$ 称为机械动量. 粒子的 Hamilton 量定义为

$$\begin{aligned} H &= \mathbf{v} \cdot \mathbf{p} - L \\ &= \mathbf{v} \cdot \left(M\mathbf{v} + \frac{q}{c}\mathbf{A} \right) - \frac{1}{2}Mv^2 + q \left(\phi - \frac{1}{c}\mathbf{v} \cdot \mathbf{A} \right) \\ &= \frac{1}{2}Mv^2 + q\phi \end{aligned} \quad (8)$$

即

$$H = \frac{1}{2M} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A} \right)^2 + q\phi \quad (9)$$

正则方程表示为

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{r}} \quad (10)$$

由此也可以得出

$$M\ddot{\mathbf{r}} = q \left(\mathbf{E} + \frac{q}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) \quad (11)$$

与式(3)同,也与规范选取无关.

在规范变换下,坐标 \mathbf{r} 与机械动量 $\boldsymbol{\pi}$ 保持不变

$$\mathbf{r}'(t) = \mathbf{r}(t), \quad \boldsymbol{\pi}'(t) = \boldsymbol{\pi}(t) \quad (12)$$

机械角动量

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \boldsymbol{\pi} = M\mathbf{r} \times \mathbf{v} \quad (13)$$

也保持不变

$$\mathbf{L}'(t) = \mathbf{L}(t) \quad (14)$$

但正则动量显然与规范有关, $\mathbf{p} = M\mathbf{v} + \frac{q}{c}\mathbf{A}$, $\mathbf{p}' = M\mathbf{v} + \frac{q}{c}\mathbf{A}'$, 所以

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p} + \frac{q}{c}\nabla f(\mathbf{r}, t) \quad (15)$$

Hamilton 量一般也与规范有关,

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2M} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A} \right)^2 + q\phi \\ H' &= \frac{1}{2M} \left(\mathbf{p}' - \frac{q}{c}\mathbf{A}' \right)^2 + q\phi' = \frac{1}{2M} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A} \right)^2 + q \left(\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t} \right) \end{aligned}$$

所以

$$H' = H - \frac{q}{c} \frac{\partial f}{\partial t} \quad (16)$$

只当 H 不显含 t 情况, 可取 A 和 φ 与 t 无关, 因而可取 $\partial f/\partial t=0$, 此时 $\varphi'(r)=\varphi(r)$, 而

$$H' = H \quad (17)$$

Hamilton 量(即能量)为守恒量^①.

2. 量子力学中的规范不变性

在量子力学中, 粒子坐标和动量算符(采用坐标表象)分别为

$$\hat{r} = r, \quad \hat{p} = -i\hbar\nabla \quad (18)$$

在经典力学中, 粒子坐标不随规范变换而变[见式(12)], 正则动量则与规范有关[见式(15)]. 试问, 量子力学中的动量算符, 是否与经典力学中正则动量一样, 随规范不同而异?

通常的做法是, 不管采取什么规范, 正则动量算符与坐标算符都不随规范而异, 即

$$\hat{r}' = \hat{r}, \quad \hat{p}' = \hat{p} = -i\hbar\nabla \quad (19)$$

在 Feynman 的书中^②对这种做法的物理考虑, 作了分析. 在理论上应如何理解?

问题的关键在于, 量子力学中的波函数和算符本身都不是直接观测的物理量, 观测的只是力学量(算符)在一定波函数描述的量子态下的平均值、本征值(允许值)及相应的概率分布. 与经典力学量直接对应的并不是算符本身, 而是算符的平均值. 因此, 与式(12)和式(15)相似, 在量子力学中要求: 在规范变换下坐标和正则动量的平均值满足下列关系^③:

$$\langle \psi'(t) | \hat{r}' | \psi'(t) \rangle = \langle \psi(t) | r | \psi(t) \rangle \quad (20)$$

$$\langle \psi'(t) | \hat{p}' | \psi'(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{p} + \frac{q}{c} \nabla f(r, t) | \psi(t) \rangle \quad (21)$$

式中 $|\psi(t)\rangle$ 和 $|\psi'(t)\rangle$ 是同一个量子态在两个规范下的表示[两个规范通过 $f(r, t)$ 相联系, 见式(1)]. 注意, 上两式中 $\hat{p}' = \hat{p} = -i\hbar\nabla$ [见式(19)]. $|\psi'(t)\rangle$ 与 $|\psi(t)\rangle$ 是什么关系才能保证式(20)和(21)成立? 令

$$\begin{aligned} |\psi'(t)\rangle &= T_f |\psi(t)\rangle \\ T_f^+ T_f &= T_f T_f^+ = 1 \end{aligned} \quad (22)$$

T_f 代表与规范变换(1)相联系的一个么正变换. 按照式(20)和式(22), 要求

$$T_f^+ \hat{r} T_f = \hat{r} \quad (23)$$

即 $[T_f, \hat{r}] = 0$, T_f 与 \hat{r} 对易, 考虑到 T_f 的么正性, 在坐标表象中

$$T_f = e^{i\chi(r, t)} \quad [\chi(r, t) \text{ 为实}] \quad (24)$$

① 即使在此情况下, $q\varphi$ 可以理解为荷电粒子的静电势能, Lagrange 量中的另一项 $\frac{q}{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}$ 并不能理解为静磁势能, 因为 Lorentz 力 $\frac{q}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}$ 总是垂直于 \mathbf{v} , 对粒子不做功. 这表现在 Hamilton 量中

$$H = \frac{1}{2M} \pi^2 + q\varphi = \frac{1}{2} M v^2 + q\varphi$$

只有一项机械动能和一项静电势能.

② *The Feynman Lectures on Physics*, Vol. 3., *Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, 1965), p. 21 ~ 25.

③ C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Faloë, *Quantum Mechanics* (John Wiley & Sons, 1977).

代入式(21),得

$$e^{-i\chi} \hat{p}' e^{i\chi} = \mathbf{p} + \frac{q}{c} \nabla f$$

利用 $\hat{p}' = \hat{p} = -i\hbar \nabla$, 上式左边 $= -i\hbar \nabla + \hbar \nabla \chi$, 由此得 $\hbar \nabla \chi = \frac{q}{c} \nabla f$, 所以

$$\chi(\mathbf{r}, t) = \frac{q}{\hbar c} f(\mathbf{r}, t) + f_0(t) \quad (25)$$

如不涉及态随时间的演化, 可以略去 $f_0(t)$, 则

$$\chi(\mathbf{r}, t) = \frac{q}{\hbar c} f(\mathbf{r}, t) \quad (26)$$

即

$$T_f = \exp\left[\frac{iq}{\hbar c} f(\mathbf{r}, t)\right] \quad (27)$$

所以在坐标表象中的波函数在两种规范下的关系为

$$\psi'(\mathbf{r}, t) = \exp\left[\frac{iq}{\hbar c} f(\mathbf{r}, t)\right] \cdot \psi(\mathbf{r}, t) \quad (28)$$

上述结论也可以根据 Schrödinger 方程的形式在规范变换下保持不变而得出, 即要求

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{1}{2M} \left(\hat{p}' - \frac{q}{c} \mathbf{A}' \right)^2 + q\varphi' \right] \psi'(\mathbf{r}, t) \quad (29)$$

式中 $\hat{p}' = -i\hbar \nabla$. 利用

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' - q\varphi' \psi' &= \exp\left(\frac{iq}{\hbar c} f\right) \cdot \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi + q\varphi \psi \right) \\ \left(-i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A}' \right) \psi' &= \exp\left(\frac{iq}{\hbar c} f\right) \cdot \left(-i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \psi \\ \left(-i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A}' \right)^2 \psi' &= \exp\left(\frac{iq}{\hbar c} f\right) \cdot \left(-i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi \end{aligned}$$

式(29)化为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[\frac{1}{2M} \left(\hat{p} - \frac{q}{c} \right)^2 + q\varphi \right] \psi, \quad \hat{p} = -i\hbar \nabla \quad (30)$$

这表明, 如波函数按照式(28)变换, 则 Schrödinger 方程的形式在规范变换下保持不变.

应该提到, 尽管动量算符表示式不随规范而变 ($\hat{p}' = \hat{p} = -i\hbar \nabla$), 它的矩阵元则随规范而异. 例如

$$\begin{aligned} & \int d^3 r \psi_1'^*(\mathbf{r}, t) \hat{p}' \psi_2'(\mathbf{r}, t) \\ &= \int d^3 r \psi_1'^*(\mathbf{r}, t) (-i\hbar \nabla) \psi_2'(\mathbf{r}, t) \\ &= \int d^3 r \psi_1^*(\mathbf{r}, t) \exp\left(-\frac{iqf}{\hbar c}\right) (-i\hbar \nabla) \exp\left(\frac{iqf}{\hbar c}\right) \psi_2(\mathbf{r}, t) \\ &= \int d^3 r \psi_1^*(\mathbf{r}, t) (-i\hbar \nabla) \psi_2(\mathbf{r}, t) + \int d^3 r \psi_1^*(\mathbf{r}, t) \left[\frac{q}{c} \nabla f(\mathbf{r}, t) \right] \psi_2(\mathbf{r}, t) \\ &= \int d^3 r \psi_1^*(\mathbf{r}, t) \hat{p} \psi_2(\mathbf{r}, t) + \int d^3 r \psi_1^*(\mathbf{r}, t) \left[\frac{q}{c} \nabla f(\mathbf{r}, t) \right] \psi_2(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (31)$$

与正则动量不同, 在规范变换下, 机械动量 $\hat{\pi} = \hat{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} = -i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A}$ 将改变为

$$\begin{aligned}\hat{\pi}' &= -i\hbar\nabla - \frac{q}{c}\mathbf{A}'(\mathbf{r},t) = -i\hbar\nabla - \frac{q}{c}[\mathbf{A}(\mathbf{r},t) + \nabla f(\mathbf{r},t)] \\ &= \hat{\pi} - \frac{q}{c}\nabla f(\mathbf{r},t)\end{aligned}\quad (32)$$

但其平均值不随规范而异(与经典力学中机械动量一样).

类似, Hamilton 算符一般也随规范而异, 因为

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\left[\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right]^2 + q\varphi(\mathbf{r},t), \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla \quad (33)$$

$$\begin{aligned}\hat{H}' &= \frac{1}{2M}\left[\hat{\mathbf{p}}' - \frac{q}{c}\mathbf{A}'(\mathbf{r},t)\right]^2 + q\varphi'(\mathbf{r},t), \quad \hat{\mathbf{p}}' = -i\hbar\nabla \\ &= \frac{1}{2M}\left[\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right]^2 + q\varphi(\mathbf{r},t) - \frac{q}{c}\frac{\partial}{\partial t}f(\mathbf{r},t) \neq \hat{H}\end{aligned}\quad (34)$$

只当电磁场不随时间变化的情况下, 可以取 \mathbf{A} 和 φ 保持与 t 无关, 因而 $\partial f/\partial t=0$. 此时 $\hat{H}'=\hat{H}$, 即 \hat{H} (守恒量) 与规范无关.

从 Schrödinger 方程形式的规范不变性来看

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi'(t)\rangle = \hat{H}'|\psi'(t)\rangle \quad (35)$$

上式左边为

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi'(t)\rangle &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}T_f|\psi(t)\rangle \quad \left(\text{式中 } T_f = \exp\left(\frac{iq}{\hbar c}f\right)\right) \\ &= -\frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t}T_f|\psi(t)\rangle + T_f i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = -\frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t}T_f|\psi(t)\rangle + T_f\hat{H}|\psi(t)\rangle \\ &= -\frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t}T_f|\psi(t)\rangle + T_f\hat{H}T_f^\dagger T_f|\psi(t)\rangle = \left(-\frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t} + T_f\hat{H}T_f^\dagger\right)|\psi'(t)\rangle\end{aligned}$$

与式(35)右边比较, 得

$$\hat{H}' = -\frac{q}{c}\frac{\partial f}{\partial t} + T_f\hat{H}T_f^\dagger \quad (36)$$

利用

$$\begin{aligned}T_f\varphi(\mathbf{r},t)T_f^\dagger &= \varphi(\mathbf{r},t) \\ T_f\left[\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right]^2 T_f^\dagger &= T_f\left[-i\hbar\nabla - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right]^2 T_f^\dagger \\ &= \left[-i\hbar\nabla - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t) - \frac{q}{c}\nabla f(\mathbf{r},t)\right]^2 \\ &= \left[\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}'(\mathbf{r},t)\right]^2\end{aligned}$$

可得

$$\begin{aligned}\hat{H}' &= \frac{1}{2M}\left[\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}'(\mathbf{r},t)\right]^2 + q\left[\varphi(\mathbf{r},t) - \frac{1}{c}\frac{\partial f(\mathbf{r},t)}{\partial t}\right] \\ &= \frac{1}{2M}\left[\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}'(\mathbf{r},t)\right]^2 + q\varphi'(\mathbf{r},t)\end{aligned}\quad (37)$$

与式(34)相同.

Hamilton 量的平均值与规范变换的关系为

$$\langle \psi' | \hat{H}' | \psi' \rangle = \langle \psi | T_f^\dagger \hat{H} T_f | \psi \rangle$$

利用式(36),有

$$\langle \psi' | \hat{H} | \psi' \rangle = \langle \psi | H - \frac{q}{c} \frac{\partial f}{\partial t} | \psi \rangle \quad (38)$$

与经典力学中相应的关系式(16)相同.

3. 路径积分理论的规范不变性

在经典力学中,荷电 q 的粒子在电磁场中的 Lagrange 量表示为(见附录 A. 1)

$$L = \frac{1}{2}mv^2 - q\varphi + \frac{q}{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} \quad (39)$$

相应的作用量为(从 $\mathbf{r}'t' \rightarrow \mathbf{r}''t''$)

$$S[\mathbf{r}(t)] = \int_{t'}^{t''} dt \left(\frac{1}{2}mv^2 - q\varphi + \frac{q}{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} \right) \quad (40)$$

在规范变换(1)下, S 变为

$$S \rightarrow S' = S + \frac{q}{c} \int_{t'}^{t''} dt \left(\mathbf{v} \cdot \nabla f + \frac{\partial}{\partial t} f \right) \quad (41)$$

利用

$$\frac{d}{dt} f = \frac{\partial}{\partial t} f + (\mathbf{v} \cdot \nabla) f$$

得

$$S' = S + \frac{q}{c} [f(\mathbf{r}'', t'') - f(\mathbf{r}', t')] \quad (42)$$

但按最小作用原理进行变分时,初终点位置是固定不变的(见附录 A. 1). 因此, $\delta S' = 0$ 与 $\delta S = 0$ 给出的结果是相同的. 这就是经典力学中的规范不变性. 下面来讨论 Feynman 的路径积分理论的规范不变性.

在 Feynman 路径积分理论中,传播子是如下构成的:

$$K(\mathbf{r}''t'', \mathbf{r}'t') = C \sum_{\text{所有路径}} \exp[iS/\hbar] \quad (43)$$

容易看出,在规范变换下

$$K \rightarrow K' = K \exp \left\{ \frac{iq}{\hbar c} [f(\mathbf{r}''t'') - f(\mathbf{r}'t')] \right\} \quad (44)$$

但

$$K(\mathbf{r}''t'', \mathbf{r}'t') = \langle \mathbf{r}'' | U(t'', t') | \mathbf{r}' \rangle \quad (45)$$

其中 $U(t'', t')$ 是描述态演化的算子,

$$| \psi(t'') \rangle = U(t'', t') | \psi(t') \rangle$$

可以看出,规范变换(1)相当于坐标本征矢作如下变换:

$$| \mathbf{r} \rangle \rightarrow \exp \left(-i \frac{qf}{\hbar c} \right) | \mathbf{r} \rangle \quad (46)$$

而波函数 $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \rightarrow$

$$\psi'(\mathbf{r}) = \exp[iqf(\mathbf{r}, t)/(\hbar c)] \psi(\mathbf{r}) \quad (47)$$

即只产生一个相位变化. 这在讨论 Schrödinger 方程的规范不变性时已得到过[见式(28)]. 在此变化下, 粒子的空间密度分布和流密度显然不改变. 对其他可观测量的观测概率分布的分析, 要复杂一些, 但也可以证明它们具有规范不变性.

在只有常磁场(不依赖时间 t), 如取 $\mathbf{A}=\mathbf{A}(\mathbf{r}), \varphi=0$, 则含时 Schrödinger 方程为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{1}{2M} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi \quad (48)$$

如 ψ 作以下相位变换:

$$\psi = \exp[-iqf(\mathbf{r})/(\hbar c)] \psi' \quad (49)$$

式中 $f(\mathbf{r})$ 取得使 $\nabla f(\mathbf{r}) = -\mathbf{A}(\mathbf{r})$, 则不难证明

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 \psi' \quad (50)$$

即矢势在方程中消失. 从不含矢势的 Schrödinger 方程, 到有矢势 $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ 出现的 Schrödinger 方程, 相应的波函数从 $\psi' \rightarrow \psi$, 即出现了一个相因子

$$\exp[-iqf(\mathbf{r})/\hbar c] = \exp\left[\frac{iq}{\hbar c} \int^r \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'\right] \quad (51)$$

人们把 $\exp\left[\frac{iq}{\hbar c} \int^r \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'\right]$ 称为 Dirac 因子.