

Rozdział 35

(U.14) Oddziaływanie z polem elektromagnetycznym

35.1 Niezmienniczość ze względu na cechowanie

W rozdziale 16 wspominaliśmy jedynie o podstawowych kwestiach związanych z cechowaniem potencjałów. Zmiana potencjałów pola elektromagnetycznego

$$\vec{A}(\vec{r}, t) \xrightarrow{\text{cechowanie}} \vec{A}'(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{r}, t) + \nabla \chi(\vec{r}, t), \quad (35.1a)$$

$$\phi(\vec{r}, t) \xrightarrow{\text{cechowanie}} \phi'(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t} \chi(\vec{r}, t), \quad (35.1b)$$

nie zmienia pól \vec{E} i \vec{B} . Pola te są fizycznie obserwowalnymi wielkościami, a potencjały są wielkościami pomocniczymi, które można wybierać z pewną dozą dowolności. Wszelkie przewidywania fizyczne nie mogą więc zależeć od wyboru cechowania – wyboru takiej, czy innej postaci potencjałów.

35.1.1 Niezmienniczość równania Schrödingera

Równanie Schrödingera pełni zasadniczą rolę w mechanice kwantowej, bowiem określa ewolucję czasową stanu układu fizycznego. Powinno więc być niezmiennicze względem transformacji cechowania potencjałów. Celem poniższych rozważań jest omówienie sensu tego stwierdzenia i zbadanie warunków przy jakich ono zachodzi.

Rozważmy cząstkę bezspinową o masie μ i ładunku q znajdującą się w polu określonym przez potencjały wektorowy \vec{A} i skalarny ϕ . Dopuszczamy też, że cząstka znajduje się dodatkowo w pewnym polu "wewnętrznym" i ma w związku z tym energię potencjalną $V(\vec{r})$. Hamiltonian cząstki ma więc postać (16.33), to jest

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + \frac{iq\hbar}{2\mu} \operatorname{div} \vec{A} - \frac{q}{\mu} \vec{A} \cdot \vec{p} + \frac{q^2}{2\mu} \vec{A}^2 + q\phi + V(\vec{r}) \quad (35.2a)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + \frac{iq\hbar}{2\mu} \operatorname{div} \vec{A} + \frac{iq\hbar}{\mu} \vec{A} \cdot \nabla + \frac{q^2}{2\mu} \vec{A}^2 + q\phi + V(\vec{r}). \quad (35.2b)$$

Niech $\psi \equiv \psi(\vec{r}, t)$ będzie funkcją falową cząstki. Nasze postępowanie będzie teraz następujące. Przede wszystkim dokonamy transformacji cechowania potencjałów zgodnie z wzorami (35.1). Następnie budujemy "nowy" hamiltonian, tzn. zawierający przecechowane potencjały \vec{A}' oraz

ϕ' . Korzystając ze wzorów (35.1) i z hamiltonianu (35.2) mamy teraz

$$H' = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + \frac{iq\hbar}{2\mu} \operatorname{div}(\vec{A} + \nabla\chi) - \frac{q}{\mu} (\vec{A} + \nabla\chi) \cdot \vec{p} + \frac{q^2}{2\mu} (\vec{A} + \nabla\chi)^2 + q \left(\phi - \frac{\partial}{\partial t} \chi \right) + V(\vec{r}). \quad (35.3)$$

Jawna postać hamiltonianu ulega zmianie, choć formalnie pozostaje niezmienniona, w tym sensie, że wyrażenia w nawiasach są nadal potencjałami pól elektromagnetycznych, ale już innymi – przecechowanymi. Zmieni się więc również jawny kształt równania Schrödingera. Przewidywania fizyczne (ewolucja funkcji falowej) powinny być jednak takie same, więc zmianie (transformacji) musi także ulec funkcja falowa. "Nowe" równanie Schrödingera, dla "nowej" funkcji falowej

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(\vec{r}, t) = H' \psi'(\vec{r}, t), \quad (35.4)$$

powinno sprowadzić się do równania wyjściowego (sprzed cechowania). Aby się o tym przekonać zapostulujemy "nową" funkcję falową w postaci

$$\psi(\vec{r}, t) \xrightarrow{\text{cechowanie}} \psi'(\vec{r}, t) = e^{i\alpha(\vec{r}, t)} \psi(\vec{r}, t), \quad (35.5)$$

gdzie $\alpha(\vec{r}, t)$ jest pewną funkcją położenia i ewentualnie czasu. Funkcję tę będziemy dalej określać. Zrobimy to na podstawie żądania niezmienniczości równania Schrödingera, żądania aby "nowe" (35.4) sprowadziło się do "starego" – bez primów. Aby tego dokonać, funkcję falową (35.5) wstawiamy do "nowego" równania (35.4), wykonujemy różniczkowanie po czasie i mnożymy obie strony przez $e^{-i\alpha}$. W rezultacie mamy

$$-\hbar \left(\frac{\partial \alpha}{\partial t} \right) \psi + i\hbar \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = e^{-i\alpha} H' e^{i\alpha} \psi. \quad (35.6)$$

Aby pójść dalej potrzebujemy wyrażenia $H' e^{i\alpha} \psi = H' \psi'$, gdzie H' jest przecechowanym hamiltonianem danym w równaniu (35.3). Przepiszmy więc hamiltonian (35.3) w postaci

$$H' = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + \frac{iq\hbar}{\mu} (\vec{A} + \nabla\chi) \cdot \nabla + \frac{iq\hbar}{2\mu} (\operatorname{div} \vec{A} + \nabla^2 \chi) + \frac{q^2}{2\mu} (\vec{A} + \nabla\chi)^2 + q \left(\phi - \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) + V(\vec{r}). \quad (35.7)$$

Łatwo widać, że działanie drugiej linii (35.7) na funkcję falową $\psi' = e^{i\alpha} \psi$ sprowadza się do mnożenia. Efektywne zmiany wprowadza jedynie pierwsza linia. Ponieważ chcemy obliczyć działanie nowego hamiltonianu na ψ' , więc koncentrujemy uwagę jedynie na członach w pierwszej linii (35.7). Obliczenia prowadzimy po kolei. Pierwszy człon (35.7) w działaniu na $e^{i\alpha} \psi$ daje więc nam co następuje.

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 (e^{i\alpha} \psi) &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla \cdot [i(\nabla\alpha) e^{i\alpha} \psi + e^{i\alpha} (\nabla\psi)] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} e^{i\alpha} [(\nabla^2 \psi) + 2i(\nabla\alpha) \cdot (\nabla\psi) + i(\nabla^2 \alpha) \psi - (\nabla\alpha)^2 \psi]. \end{aligned} \quad (35.8)$$

Podobnie obliczamy działanie drugiego członu hamiltonianu (35.7) na funkcję falową $\psi' = e^{i\alpha} \psi$. W tym wypadku mamy

$$\begin{aligned} \frac{iq\hbar}{\mu} (\vec{A} + \nabla\chi) \cdot \nabla (e^{i\alpha} \psi) &= \frac{iq\hbar}{\mu} e^{i\alpha} (\vec{A} + \nabla\chi) \cdot [i(\nabla\alpha) \psi + \nabla\psi] \\ &= \frac{iq\hbar}{\mu} e^{i\alpha} [i\vec{A} \cdot (\nabla\alpha) \psi + \vec{A} \cdot (\nabla\psi) + i(\nabla\chi) \cdot (\nabla\alpha) \psi + (\nabla\chi) \cdot (\nabla\psi)]. \end{aligned} \quad (35.9)$$

Obliczone dwa człony (35.8), (35.9) oraz hamiltonian (35.7) wstawiamy teraz do równania Schrödingera (35.6). Człony wykładnicze znoszą się i otrzymujemy

$$\begin{aligned}
& -\hbar \left(\frac{\partial \alpha}{\partial t} \right) \psi + i\hbar \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \\
& = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[(\nabla^2 \psi) + 2i (\nabla \alpha) \cdot (\nabla \psi) + i (\nabla^2 \alpha) \psi - (\nabla \alpha)^2 \psi \right] \\
& \quad + \frac{iq\hbar}{\mu} \left[i\vec{A} \cdot (\nabla \alpha) \psi + \vec{A} \cdot (\nabla \psi) + i (\nabla \chi) \cdot (\nabla \alpha) \psi + (\nabla \chi) \cdot (\nabla \psi) \right] \\
& \quad + \frac{iq\hbar}{2\mu} (\operatorname{div} \vec{A} + \nabla^2 \chi) \psi + \frac{q^2}{2\mu} \left[\vec{A}^2 + 2\vec{A} \cdot (\nabla \chi) + (\nabla \chi)^2 \right] \psi \\
& \quad + q \left(\phi - \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) \psi + V(\vec{r})\psi.
\end{aligned} \tag{35.10}$$

Porządkujemy powyższe wyrażenie i przegrupowujemy pewne wyrazy

$$\begin{aligned}
& i\hbar \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) - \hbar \left(\frac{\partial \alpha}{\partial t} \right) \psi \\
& = -\frac{\hbar^2}{2\mu} (\nabla^2 \psi) + \frac{iq\hbar}{\mu} \vec{A} \cdot (\nabla \psi) + \frac{iq\hbar}{2\mu} (\operatorname{div} \vec{A}) \psi + \frac{q^2}{2\mu} \vec{A}^2 \psi + q\phi\psi + V(\vec{r})\psi \\
& \quad - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[2i (\nabla \alpha) \cdot (\nabla \psi) + i (\nabla^2 \alpha) \psi - (\nabla \alpha)^2 \psi \right] \\
& \quad + \frac{iq\hbar}{\mu} \left[i\vec{A} \cdot (\nabla \alpha) \psi + i (\nabla \chi) \cdot (\nabla \alpha) \psi + (\nabla \chi) \cdot (\nabla \psi) \right] \\
& \quad + \frac{iq\hbar}{2\mu} (\nabla^2 \chi) \psi + \frac{q^2}{2\mu} \left[2\vec{A} \cdot \nabla \chi + (\nabla \chi)^2 \right] \psi - q \left(\frac{\partial \chi}{\partial t} \right) \psi.
\end{aligned} \tag{35.11}$$

Pierwszy człon po lewej stronie i druga linia odtwarzają równanie Schrödingera sprzed cechowania. Aby się w tym upewnić wystarczy porównać drugą linię z hamiltonianem (35.2b). Zapewnienie niezmienniczości polega więc na żądaniu, aby "nowe" równanie Schrödingera odtwarzało "stare". Jest to możliwe, pod warunkiem, że drugi człon po lewej oraz trzy ostatnie linie znikną (będą równe zero). Musimy więc w odpowiedni sposób dobrać nieznana funkcję $\alpha(\vec{r}, t)$. Z porównania pochodnych czasowych (drugi składnik po lewej i ostatni po prawej) otrzymujemy pierwszy warunek dla poszukiwanej funkcji $\alpha(\vec{r}, t)$. Drugi warunek wynika z żądania, aby trzy ostatnie linie w (35.11) (za wyjątkiem ostatniego członu) zerowały się. W ten sposób mamy pierwszy warunek w postaci

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = \frac{q}{\hbar} \frac{\partial \chi}{\partial t}. \tag{35.12}$$

Natomiast drugi warunek, po otwarciu nawiasów kwadratowych w trzech ostatnich liniach wzoru (35.11), jest następujący

$$\begin{aligned}
0 = & -\frac{i\hbar^2}{\mu} (\nabla \alpha) \cdot (\nabla \psi) - \frac{i\hbar^2}{2\mu} (\nabla^2 \alpha) \psi + \frac{\hbar^2}{2\mu} (\nabla \alpha)^2 \psi \\
& - \frac{q\hbar}{\mu} \vec{A} \cdot (\nabla \alpha) \psi - \frac{q\hbar}{\mu} (\nabla \chi) \cdot (\nabla \alpha) \psi + \frac{iq\hbar}{\mu} (\nabla \chi) \cdot (\nabla \psi) \\
& + \frac{iq\hbar}{2\mu} (\nabla^2 \chi) \psi + \frac{q^2}{\mu} \vec{A} \cdot (\nabla \chi) \psi + \frac{q^2}{2\mu} (\nabla \chi)^2 \psi.
\end{aligned} \tag{35.13}$$

Porządkujemy powyższy warunek. Grupujemy człony zawierające $\nabla \psi$, a więc pierwszy i szósty,

a także człony z potencjałem wektorowym czyli czwarty i ósmy. Dostajemy

$$\begin{aligned}
0 = & -\frac{i\hbar^2}{\mu} \left[\nabla\alpha - \frac{q}{\hbar} \nabla\chi \right] \cdot (\nabla\psi) - \frac{q\hbar}{\mu} \vec{A} \cdot \left[\nabla\alpha - \frac{q}{\hbar} \nabla\chi \right] \psi \\
& -\frac{i\hbar^2}{2\mu} (\nabla^2\alpha) \psi + \frac{\hbar^2}{2\mu} (\nabla\alpha)^2 \psi - \frac{q\hbar}{\mu} (\nabla\chi) \cdot (\nabla\alpha) \psi \\
& + \frac{iq\hbar}{2\mu} (\nabla^2\chi) \psi + \frac{q^2}{2\mu} (\nabla\chi)^2 \psi.
\end{aligned} \tag{35.14}$$

Stąd już prawie widać rozwiązanie dla poszukiwanej funkcji $\alpha(\vec{r}, t)$. Wygodnie jest jednak dalej porządkować warunek (35.14). Grupujemy wyrazy z laplasjanami ∇^2 i dostajemy

$$\begin{aligned}
0 = & -\frac{i\hbar^2}{\mu} \left[\nabla\alpha - \frac{q}{\hbar} \nabla\chi \right] \cdot (\nabla\psi) - \frac{q\hbar}{\mu} \vec{A} \cdot \left[\nabla\alpha - \frac{q}{\hbar} \nabla\chi \right] \psi \\
& -\frac{i\hbar^2}{2\mu} \left[(\nabla^2\alpha) - \frac{q}{\hbar} (\nabla^2\chi) \right] \psi \\
& + \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[(\nabla\alpha)^2 - \frac{2q}{\hbar} (\nabla\chi) \cdot (\nabla\alpha) + \frac{q^2}{\hbar^2} (\nabla\chi)^2 \right] \psi.
\end{aligned} \tag{35.15}$$

Ponieważ $\nabla^2 = \text{div grad}$, zaś w ostatnim członie mamy po prostu kwadrat, więc w końcu otrzymujemy warunek

$$\begin{aligned}
0 = & -\frac{i\hbar^2}{\mu} \left[\nabla\alpha - \frac{q}{\hbar} \nabla\chi \right] \cdot (\nabla\psi) - \frac{q\hbar}{\mu} \vec{A} \cdot \left[\nabla\alpha - \frac{q}{\hbar} \nabla\chi \right] \psi \\
& -\frac{i\hbar^2}{2\mu} \left[\text{div} \left(\nabla\alpha - \frac{q}{\hbar} \nabla\chi \right) \right] \psi + \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\nabla\alpha - \frac{q}{\hbar} \nabla\chi \right)^2 \psi.
\end{aligned} \tag{35.16}$$

Jasno więc widać, że drugim warunkiem jaki musimy nałożyć na funkcję $\alpha(\vec{r}, t)$ jest $\text{grad } \alpha = (q/\hbar) \text{grad } \chi$. Wnoskujemy więc, że jeśli transformacji cechowania potencjałów towarzyszy transformacja funkcji falowej $\psi(\vec{r}, t) \rightarrow \psi'(\vec{r}, t) = e^{i\alpha} \psi(\vec{r}, t)$, to równanie Schrödingera pozostaje niezmiennicze pod warunkiem, że funkcja $\alpha(\vec{r}, t)$ spełnia równania

$$\frac{\partial\alpha}{\partial t} = \frac{q}{\hbar} \frac{\partial\chi}{\partial t}, \quad \text{oraz} \quad \nabla\alpha = \frac{q}{\hbar} \nabla\chi, \tag{35.17}$$

bowiem wtedy równanie (35.11) redukuje się do odpowiedniego równania Schrödingera sprzed cechowania. Oczywiście najprostszym rozwiązaniem równań (35.17) dla funkcji $\alpha(\vec{r}, t)$ jest

$$\alpha(\vec{r}, t) = \frac{q}{\hbar} \chi(\vec{r}, t) \quad \implies \quad \psi'(\vec{r}, t) = \exp\left(\frac{iq}{\hbar} \chi(\vec{r}, t)\right) \psi(\vec{r}, t). \tag{35.18}$$

Tym samym kwestię niezmienniczości równania Schrödingera przy cechowaniu potencjałów pól elektromagnetycznych możemy uznać za zakończoną.

35.1.2 Niezmienniczość prądu prawdopodobieństwa

W głównej części wykładu wspominaliśmy także o niezmienniczości gęstości i prądu prawdopodobieństwa względem cechowania potencjałów. Niezmienniczość gęstości $\rho = \psi^* \psi$ przy transformacji (35.18) funkcji falowej jest oczywista.

Zbadamy prąd prawdopodobieństwa, który w obecności zewnętrznego pola elektromagnetycznego wyraża się wzorem (16.54), to jest

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2\mu i} (\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*) - \frac{q}{\mu} \vec{A} \psi^* \psi \tag{35.19}$$

Chcemy sprawdzić, czy prąd prawdopodobieństwa jest faktycznie niezmienniczy. Żądamy więc, aby prąd po cechowaniu

$$\vec{j} \xrightarrow{\text{cechowanie}} \vec{j}' = \frac{\hbar}{2\mu i} \left(\psi'^* \nabla \psi' - \psi' \nabla \psi'^* \right) - \frac{q}{\mu} \vec{A}' \psi'^* \psi' \quad (35.20)$$

miał postać identyczną jak przed cechowaniem. Aby to sprawdzić, dokonujemy transformacji potencjału wektorowego według (35.1a), a funkcji falowej zgodnie z (35.18). Pamiętajmy, że funkcja α proporcjonalna do funkcji cechowania χ jest rzeczywista. Z powyższego równania otrzymujemy wówczas "nowy" prąd (stosujemy notację skrótową)

$$\vec{j}' = \frac{\hbar}{2\mu i} \left\{ e^{-i\alpha} \psi^* \nabla (e^{i\alpha} \psi) - e^{i\alpha} \psi \nabla (e^{-i\alpha} \psi^*) \right\} - \frac{q}{\mu} (\vec{A} + \nabla \chi) \psi^* \psi. \quad (35.21)$$

Wykonujemy niezbędne różniczkowania. Otrzymujemy

$$\begin{aligned} \vec{j}' &= \frac{\hbar}{2\mu i} \left\{ e^{-i\alpha} \psi^* \left[i(\nabla \alpha) e^{i\alpha} \psi + e^{i\alpha} (\nabla \psi) \right] \right. \\ &\quad \left. - e^{i\alpha} \psi \left[-i(\nabla \alpha) e^{-i\alpha} \psi^* + e^{-i\alpha} (\nabla \psi^*) \right] \right\} - \frac{q}{\mu} \left(\vec{A} + \frac{\hbar}{q} (\nabla \alpha) \right) \psi^* \psi, \end{aligned} \quad (35.22)$$

bowiem $\hbar \alpha = q \chi$. Funkcje wykładnicze w nawiasie klamrowym upraszczają się

$$\begin{aligned} \vec{j}' &= \frac{\hbar}{2\mu i} \left\{ i(\nabla \alpha) \psi \psi^* + \psi^* (\nabla \psi) \right. \\ &\quad \left. + i(\nabla \alpha) \psi \psi^* + \psi (\nabla \psi^*) \right\} - \frac{q}{\mu} \vec{A} - \frac{\hbar}{\mu} (\nabla \alpha) \psi \psi^*. \end{aligned} \quad (35.23)$$

Łatwo zauważyć, że składniki zawierające $\nabla \alpha$ w nawiasie klamrowym znoszą się z ostatnim składnikiem w drugiej linii. A więc odtwarza się wzór na prąd prawdopodobieństwa identyczny z tym sprzed cechowania. Wnioskujemy więc, że nie tylko gęstość, ale także i prąd prawdopodobieństwa są niezmiennicze względem cechowania. A zatem piszemy

$$\vec{j} \xrightarrow{\text{cechowanie}} \vec{j}' = \vec{j} \quad (35.24)$$

Przewidywania teorii nie zależą od wyboru cechowania.

35.2 Cechowanie i mechanika kwantowa

35.2.1 Uwagi wstępne

W poprzedniej części rozdziału stwierdziliśmy, że równanie Schrödingera dla cząstki naładowanej poruszającej się w polu elektromagnetycznym jest niezmiennicze względem transformacji cechowania potencjałów jeśli towarzyszy temu transformacja (35.18) funkcji falowej. Wrócimy raz jeszcze do tego samego problemu, ale w zupełnie inny, bardziej formalny sposób.

Przeprowadzone poprzednio rozumowanie polegało na tym, że równanie Schrödingera z "nowym" hamiltonianem (35.3) sprowadziliśmy do równania ze "starym" hamiltonianem (35.2). Wypisując te dwa hamiltoniany poczyniliśmy jedno milczące lecz ważne założenie. Otóż przyjeśliśmy, że operatory położenia i pędu nie ulegają zmianom. Wyjaśnienie jest następujące. Reguły kwantowania biorą się z kanonicznej relacji komutacyjnej

$$[x_j, p_k] = i\hbar \delta_{jk}, \quad (35.25)$$

która prowadzi do tego, że w reprezentacji położeniowej operator położenia działa jak mnożenie przez \vec{r} , zaś operator pędu to $-i\hbar \nabla$. Relacje komutacyjne są takie same w dowolnym cechowaniu

(w żaden sposób nie zależą od cechowania). Dlatego też operatory położenia i pędu są takie same w dowolnym cechowaniu. Stąd właśnie wynika, że w hamiltonianach (35.2) i (35.3) występuje ten sam operator pędu. Operator położenia wchodzący do hamiltonianu na przykład poprzez energię $V(\vec{r})$ jest też taki sam w obu cechowaniach, więc $V(\vec{r})$ jest niezmienną. Powyższe uwagi zapiszemy jawnie

$$\hat{\vec{r}} \equiv \hat{\vec{R}} = \vec{r} \xrightarrow{\text{cechowanie}} \hat{\vec{r}}' \equiv \hat{\vec{R}}' = \vec{r}, \quad (35.26a)$$

$$\hat{\vec{p}} \equiv \hat{\vec{P}} = -i\hbar\nabla \xrightarrow{\text{cechowanie}} \hat{\vec{p}}' \equiv \hat{\vec{P}}' = -i\hbar\nabla, \quad (35.26b)$$

gdzie wyraźnie zaznaczyliśmy, że mówimy o operatorach.

Jak wiemy z poprzednich rozważań, niezmienniczość praw fizyki (przewidywań fizycznych) przy transformacji cechowania wymaga jednak transformacji funkcji falowej, a więc stanu $|\psi(t)\rangle$ układu. Zajmiemy się teraz nieco bardziej formalnym omówieniem tego zagadnienia.

35.2.2 Transformacja wektora stanu

Założenia wyjściowe

Odwołując się do fizyki (mechaniki) klasycznej przypominamy, że jeśli przed transformacją cechowania potencjałów cząstkę opisywały klasyczne zmienne dynamiczne $(\vec{r}_{kl}, \vec{p}_{kl})$, to po transformacji przechodzą one w

$$\begin{aligned} \vec{r}_{kl} &\xrightarrow{\text{cechowanie}} \vec{r}'_{kl} = \vec{r}_{kl}, \\ \vec{p}_{kl} &\xrightarrow{\text{cechowanie}} \vec{p}'_{kl} = \vec{p}_{kl} + q\nabla\chi(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (35.27)$$

Położenie nie ulega zmianie. Pęd kanoniczny jest po cechowaniu inny, jego wartość sprzed cechowania została zmieniona o $q\nabla\chi$.

Przechodząc na grunt mechaniki kwantowej nie mówimy o zmiennych dynamicznych, ale o wartościach oczekiwanych obserwabli. Wiemy, że transformacji cechowania potencjałów musi towarzyszyć zmiana stanu układu $|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi'(t)\rangle$. Wartości oczekiwane położenia i pędu po cechowaniu to $\langle\psi'(t)|\hat{\vec{R}}'|\psi'(t)\rangle$ oraz $\langle\psi'(t)|\hat{\vec{P}}'|\psi'(t)\rangle$. Na mocy analogii klasycznej, powinny być one związane z wartościami oczekiwanymi sprzed transformacji cechowania w następujący sposób

$$\langle\psi'(t)|\hat{\vec{R}}'|\psi'(t)\rangle = \langle\psi(t)|\hat{\vec{R}}|\psi(t)\rangle, \quad (35.28a)$$

$$\langle\psi'(t)|\hat{\vec{P}}'|\psi'(t)\rangle = \langle\psi(t)|(\hat{\vec{P}} + q\nabla\chi)|\psi(t)\rangle. \quad (35.28b)$$

W lewych stronach wykorzystujemy teraz związki (35.26) i mamy

$$\langle\psi'(t)|\hat{\vec{R}}|\psi'(t)\rangle = \langle\psi(t)|\hat{\vec{R}}|\psi(t)\rangle, \quad (35.29a)$$

$$\langle\psi'(t)|\hat{\vec{P}}|\psi'(t)\rangle = \langle\psi(t)|(\hat{\vec{P}} + q\nabla\chi)|\psi(t)\rangle, \quad (35.29b)$$

które posłużą nam do wyznaczenia transformacji

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{cechowanie}} |\psi'\rangle. \quad (35.30)$$

Operator T

Transformacja (35.30) musi być związana z pewnym operatorem T (w ogólności zależnym od cechowania, tj. od funkcji $\chi(\vec{r}, t)$). Piszemy więc

$$|\psi'\rangle = \mathsf{T}|\psi\rangle. \quad (35.31)$$

Zanim zajmiemy się poszukiwaniem tego operatora zauważmy, że stan $|\psi(t)\rangle$ musi być unormowany (tak samo zresztą jak stan $|\psi'(t)\rangle$). Operator \mathbf{T} nie może zmieniać normowania stanu, więc musi być unitarny

$$\mathbf{T}\mathbf{T}^\dagger = \mathbf{T}^\dagger\mathbf{T} = \hat{\mathbf{1}}. \quad (35.32)$$

Posługując się operatorem \mathbf{T} w relacjach (35.29) otrzymujemy

$$\langle \psi(t) | \mathbf{T}^\dagger \hat{\mathbf{R}} \mathbf{T} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{\mathbf{R}} | \psi(t) \rangle, \quad (35.33a)$$

$$\langle \psi(t) | \mathbf{T}^\dagger \hat{\mathbf{P}} \mathbf{T} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | (\hat{\mathbf{P}} + q\mathbf{\nabla}\chi) | \psi(t) \rangle. \quad (35.33b)$$

Nie zakładaliśmy tu niczego o stanie $|\psi(t)\rangle$ (sprzed cechowania), więc może on być dowolny. Zatem z (35.33) wynikają relacje operatorowe

$$\mathbf{T}^\dagger \hat{\mathbf{R}} \mathbf{T} = \hat{\mathbf{R}}, \quad (35.34a)$$

$$\mathbf{T}^\dagger \hat{\mathbf{P}} \mathbf{T} = \hat{\mathbf{P}} + q\mathbf{\nabla}\chi, \quad (35.34b)$$

z których wyznaczymy jawną postać operatora \mathbf{T} .

Jawna postać operatora \mathbf{T}

Relacja (35.34a) implikuje, że operator \mathbf{T} komutuje z operatorem położenia. Z jego unitarności wynika bowiem, że $\hat{\mathbf{R}}\mathbf{T} = \mathbf{T}\hat{\mathbf{R}}$. Możemy więc uznać, że \mathbf{T} jest funkcją położenia. Skoro zaś jest także unitarny, to można go szukać w postaci $\mathbf{T} = \exp(i\hat{B}(\vec{r}))$, gdzie $\hat{B}(\vec{r})$ jest hermitowskim operatorem będącym funkcją tylko operatora położenia. Nie będziemy szukać operatora \hat{B} , lecz pójdziemy nieco inną drogą. Wykorzystamy w tym celu równanie (35.34b),

$$\hat{\mathbf{P}}\mathbf{T} = \mathbf{T}\hat{\mathbf{P}} + q\mathbf{T}\mathbf{\nabla}\chi \quad (35.35)$$

co możemy zapisać w sposób równoważny, za pomocą komutatora

$$[\hat{\mathbf{P}}, \mathbf{T}] = q\mathbf{T}\mathbf{\nabla}\chi. \quad (35.36)$$

Operator pędu to $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\mathbf{\nabla}$, który dla dowolnej funkcji położenia $G(\vec{r})$ spełnia relację komutacyjną

$$[\hat{\mathbf{P}}, G(\vec{r})] = -i\hbar\mathbf{\nabla}G(\vec{r}). \quad (35.37)$$

Dowód tej relacji można przeprowadzić identycznie z dowodem związku (34.23), dlatego też pominiemy go w tym miejscu. Przyrównując prawe strony formuł (35.36) i (35.37) (w tej ostatniej kładziemy $G = \mathbf{T}$) otrzymujemy

$$-i\hbar\mathbf{\nabla}\mathbf{T} = q\mathbf{T}\mathbf{\nabla}\chi \quad \implies \quad \mathbf{\nabla}\mathbf{T}(\vec{r}) = \frac{iq}{\hbar}\mathbf{T}(\vec{r})\mathbf{\nabla}\chi, \quad (35.38)$$

gdzie jawnie zaznaczyliśmy, że poszukiwany operator \mathbf{T} jest funkcją położenia. Scałkowanie powyższego równania daje następujący wynik

$$\mathbf{T}(\vec{r}) = C_0 \exp\left[\frac{iq}{\hbar}\chi(\vec{r})\right] \quad (35.39)$$

Z unitarności \mathbf{T} wynika warunek $|C_0|^2 = 1$, więc najprościej jest wziąć $C_0 = 1$ (globalny czynnik fazowy i tak nie ma znaczenia). Kończąc nasze rozumowanie stwierdzamy, że

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}(\vec{r}) = \exp\left[\frac{iq}{\hbar}\chi(\vec{r})\right]. \quad (35.40)$$

Operator T jest funkcją położenia (jest także parametryzowany przez czas t), więc w reprezentacji położeniowej mamy od razu

$$\langle \vec{r} \rangle \psi \xrightarrow{\text{cechowanie}} \langle \vec{r} \rangle \psi' = \exp \left[\frac{iq}{\hbar} \chi(\vec{r}, t) \right] \langle \vec{r} \rangle \psi. \quad (35.41)$$

Wniosek ten jest dokładnie zbieżny z uzyskanym poprzednio. Transformacja cechowania potencjałów musi być (aby zapewnić niezmienniczość teorii) stowarzyszona z transformacją funkcji falowej, polegającą na pomnożeniu przez czynnik fazowy zmieniający się od punktu do punktu. Czynnik ten nie jest jednym, globalnym czynnikiem fazowym. A zatem czynnika tego nie wolno opuścić.

35.2.3 Ewolucja wektora stanu

Wykazaliśmy już, że równanie Schrödingera jest niezmiennicze względem transformacji cechowania, przy czym funkcja falowa podlega transg=formacji (35.41). Zbadamy ten problem raz jeszcze, tym razem bardziej formalnie przez zastosowanie omówionego wyżej operatora T . Rozpoczynamy zn.ow od pełnego równania Schrödingera (w "starym" cechowaniu) ma ogólną postać

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (35.42)$$

Szukamy odpowiedniego równania ruchu dla wektora stanu w "nowym" cechowaniu, tj. dla $|\psi'(t)\rangle = \hat{T} |\psi(t)\rangle$. Oczywiście więc, pochodną czasową "nowego" keta to

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle = i\hbar \mathsf{T} \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle + i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathsf{T} \right) |\psi(t)\rangle. \quad (35.43)$$

Pochodna \hat{T} wynika z jego definicji, zatem

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle &= \mathsf{T} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle - q \left(\frac{\partial \chi}{\partial t} \right) \mathsf{T} |\psi(t)\rangle. \\ &= \mathsf{T} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle - q \left(\frac{\partial \chi}{\partial t} \right) |\psi'(t)\rangle, \end{aligned} \quad (35.44)$$

bowiem $\mathsf{T} |\psi(t)\rangle = |\psi'(t)\rangle$. Pochodną czasową "starego" keta eliminujemy za pomocą równania Schrödingera (35.42) gdzie wstawiamy także $|\psi(t)\rangle = \mathsf{T}^\dagger |\psi'(t)\rangle$. W ten sposób otrzymujemy

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle &= \mathsf{T} \hat{H} \mathsf{T}^\dagger |\psi'(t)\rangle - q \left(\frac{\partial \chi}{\partial t} \right) |\psi'(t)\rangle \\ &= \hat{H}' |\psi'(t)\rangle - q \left(\frac{\partial \chi}{\partial t} \right) |\psi'(t)\rangle. \end{aligned} \quad (35.45)$$

czyli równanie Schrödingera po transformacji cechowania. Trzeba jednak przeanalizować przetransformowany hamiltonian $\hat{H}' = \mathsf{T} \hat{H} \mathsf{T}^\dagger$. Hamiltonian \hat{H} cząstki bezspinowej w polu elektromagnetycznym sprzed cechowania ma postać

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\phi, \quad (35.46)$$

gdzie nie uwzględniamy pól – oddziaływań wewnętrznych. Potencjały \vec{A} oraz ϕ są funkcjami położenia. Na mocy relacji (35.34a) komutują z operatorem \hat{T} . Z jego unitarności wynika więc, że

$$\hat{H}' = \mathsf{T} \hat{H} \mathsf{T}^\dagger = \frac{1}{2\mu} (\mathsf{T} \vec{p} \mathsf{T}^\dagger - q\vec{A})^2 + q\phi \quad (35.47)$$

Obliczamy przetransformowany operator pędu $\vec{p}' = \mathbf{T} \vec{p} \mathbf{T}^\dagger$. Niech $f(\vec{r})$ oznacza dowolną funkcję falową na którą działa operator \vec{p}' . Mamy więc

$$\begin{aligned} \vec{p}' f(\vec{r}) &= e^{iq\chi/\hbar} (-i\hbar \nabla) e^{-iq\chi/\hbar} f(\vec{r}) \\ &= -i\hbar e^{iq\chi/\hbar} \left[e^{-iq\chi/\hbar} \left(-\frac{iq}{\hbar} \nabla \chi \right) f(\vec{r}) + e^{-iq\chi/\hbar} \nabla f(\vec{r}) \right] \\ &= (\vec{p} - q(\nabla \chi)) f(\vec{r}) \end{aligned} \quad (35.48)$$

Z dowolności funkcji falowej wynika przetransformowany operator pędu

$$\vec{p}' = \mathbf{T} \vec{p} \mathbf{T}^\dagger = \vec{p} - q(\nabla \chi). \quad (35.49)$$

Wykorzystujemy ten wynik w operatorze (35.47), który następnie podstawiamy do równania Schrödingera (35.45) i otrzymujemy

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle = \left[\frac{1}{2\mu} (\vec{p} - q(\nabla \chi) - q\vec{A})^2 + q \left(\phi - \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) \right] |\psi'(t)\rangle. \quad (35.50)$$

Rozpoznajemy "nowe" – przecechowane potencjały (35.1) i równanie (35.50) możemy przepisać w postaci

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle = \left[\frac{1}{2\mu} (\vec{p} - q\vec{A}')^2 + q\phi' \right] |\psi'(t)\rangle \quad (35.51)$$

"Nowe" równanie Schrödingera, z "nowymi" potencjałami ma więc postać identyczną z odpowiednim równaniem sprzed cechowania. Warunkiem tego jest transformacja

$$|\psi(t)\rangle \xrightarrow{\text{cechowanie}} |\psi'(t)\rangle = \mathbf{T} |\psi(t)\rangle = \exp \left[\frac{iq}{\hbar} \chi(\vec{r}, t) \right] |\psi(t)\rangle \quad (35.52)$$

Innymi słowy stwierdzamy, że równanie Schrödingera jest niezmiennicze względem transformacji cechowania, jeśli towarzyszy jej transformacja (35.52) stanu układu.

Powyższe rozważania nie ulegną żadnej zmianie, jeśli w hamiltonianie uwzględnimy dodatkowo potencjał $V(\vec{r})$ innej natury (np. pole coulombowskie jądra atomowego). Wynika to stąd, że taki potencjał jest funkcją jedynie położenia, i komutuje z operatorem \mathbf{T} , co wynika z relacji komutacyjnej (35.34a).
