第七章　带电粒子在电磁场中的运动

§7.1 带电粒子在电磁场中的 Schrödinger 方程

7.1.1 带电粒子在电磁场中的经典 Hamiltonian 正则动量

设粒子的质量为 μ，电荷为 q，电场强度为 $\vec{\mathrm{E}}$，磁场强度为 $\vec{\mathrm{B}}$，那么这个粒子的经典运动方程是

$$\mu\ddot{\vec{r}}=q(\vec{\mathrm{E}}+\dot{\vec{r}}\times\vec{\mathrm{B}}).\ \text{（SI）}$$

问题是：什么样的 Hamiltonian $H(\vec{r},\vec{P})$ 给出的正则运动方程是上面这个方程？答案是

$$H(\vec{r},\vec{P})=\frac{1}{2\mu}\left(\vec{P}-q\,\vec{A}(\vec{r},t)\right)^2+q\,\phi(\vec{r},t),$$

其中 $\phi(\vec{r},t)$ 是电磁场的标量势，$\vec{A}(\vec{r},t)$ 是矢量势，它们通过下述关系给出电场强度 $\vec{\mathrm{E}}$ 和磁场强度 $\vec{\mathrm{B}}$：

$$\boxed{\begin{aligned}\vec{\mathrm{E}}&=-\nabla\phi-\frac{\partial\vec{A}}{\partial t},\\ \vec{\mathrm{B}}&=\nabla\times\vec{A}.\end{aligned}}$$

证明如下。正则运动方程是

$$\dot{x}_i=\frac{\partial H}{\partial P_i},$$

$$\dot{P}_i=-\frac{\partial H}{\partial x_i},$$

$i=1,2,3=x,y,z$，注意其中的 $\vec{P}$ 是正则动量。现在

$$H(\vec{r},\vec{P})=\frac{1}{2\mu}(P_j-q\,A_j)(P_j-q\,A_j)+q\,\phi,$$

这里重复的指标 j 意味着**对其求和**，所以第一个运动方程是

$$\dot{x}_i=\frac{1}{2\mu}\frac{\partial}{\partial P_i}\Big((P_j-q\,A_j)(P_j-q\,A_j)\Big)=\frac{1}{\mu}\delta_{ij}(P_j-q\,A_j)=\frac{1}{\mu}(P_i-q\,A_i),$$

即是

$$P_i=\mu\dot{x}_i+q\,A_i,$$

第二个运动方程是

$$\dot{P}_i=-\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{1}{2\mu}(P_j-q\,A_j)(P_j-q\,A_j)+q\,\phi\right)=q\left(\frac{1}{\mu}(P_j-q\,A_j)\frac{\partial A_j}{\partial x_i}-\frac{\partial\phi}{\partial x_i}\right)=q\left(\dot{x}_j\frac{\partial A_j}{\partial x_i}-\frac{\partial\phi}{\partial x_i}\right),$$

把第一个运动方程 $P_i=\mu\dot{x}_i+q\,A_i$ 再对时间微分一次得 $\mu\ddot{x}_i=\dot{P}_i-q\,\dot{A}_i$，代入上式得

$$\mu\ddot{x}_i=q\left(\dot{x}_j\frac{\partial A_j}{\partial x_i}-\frac{\partial\phi}{\partial x_i}-\frac{dA_i}{dt}\right)=q\left(\dot{x}_j\frac{\partial A_j}{\partial x_i}-\frac{\partial\phi}{\partial x_i}-\frac{\partial A_i}{\partial t}-\dot{x}_j\frac{\partial A_i}{\partial x_j}\right),$$

其中注意对时间的全导数等于偏导数加牵连导数，即

$$\frac{dA_i(\vec{r},t)}{dt}=\frac{\partial A_i}{\partial t}+\dot{x}_j\frac{\partial A_i}{\partial x_j}.$$

上式中的 $\dot{x}_j(\partial A_j/\partial x_i)-\dot{x}_j(\partial A_i/\partial x_j)$（对 j 求和）可以改写为

$$\dot{x}_j\frac{\partial A_j}{\partial x_i}-\dot{x}_j\frac{\partial A_i}{\partial x_j}=\left(\dot{\vec{r}}\times(\nabla\times\vec{A})\right)_i,$$

例如当 $i=1$ 的时候，把对指标 j 的求和明显地写出来，得

$$\dot{x}_j \frac{\partial A_j}{\partial x_1} - \dot{x}_j \frac{\partial A_1}{\partial x_j} = \dot{x}_1 \frac{\partial A_1}{\partial x_1} + \dot{x}_2 \frac{\partial A_2}{\partial x_1} + \dot{x}_3 \frac{\partial A_3}{\partial x_1} - \dot{x}_1 \frac{\partial A_1}{\partial x_1} - \dot{x}_2 \frac{\partial A_1}{\partial x_2} - \dot{x}_3 \frac{\partial A_1}{\partial x_3},$$

其中$\pm \dot{x}_1(\partial A_1/\partial x_1)$彼此消掉了，其余的项再适当地排列一下，就得

$$\dot{x}_j \frac{\partial A_j}{\partial x_1} - \dot{x}_j \frac{\partial A_1}{\partial x_j} = \dot{x}_2\left(\frac{\partial A_2}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_2}\right) - \dot{x}_3\left(\frac{\partial A_1}{\partial x_3} - \frac{\partial A_3}{\partial x_1}\right) = \dot{x}_2(\nabla\times\vec{A})_3 - \dot{x}_3(\nabla\times\vec{A})_2 = \left(\dot{\vec{r}}\times(\nabla\times\vec{A})\right)_1,$$

$i=2,3$的情形也类似。所以我们最后得到

$$\mu\ddot{\vec{r}} = q\left(-\nabla\phi - \partial_t\vec{A} + \dot{\vec{r}}\times(\nabla\times\vec{A})\right) = q(\mathrm{E} + \dot{\vec{r}}\times\mathrm{B}). \quad \blacksquare$$

注意，现在粒子的**正则动量**$\vec{P}$是两部分之和：

$$\vec{P} = \mu\dot{\vec{r}} + q\vec{A},$$

其中$\mu\dot{\vec{r}} = \mu\vec{v}$称为**机械动量**，$q\vec{A}$称为**电磁动量**。这是 Lorentz 力的特殊性质所决定的，因为磁场力与粒子的速度有关。

7.1.2 带电粒子在电磁场中的 Schrödinger 方程 规范条件

从经典 Hamiltonian 构造量子 Hamiltonian 算符的规则是把**正则动量**替换为算符$\hat{\vec{P}} \equiv -\mathrm{i}\hbar\nabla$，所以带电粒子在电磁场中的 Hamiltonian 算符是

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}(\hat{\vec{P}} - q\vec{A})^2 + q\phi, \quad (\hat{\vec{P}} \equiv -\mathrm{i}\hbar\nabla)$$

Schrödinger 方程是

$$\boxed{\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(\frac{1}{2\mu}(\hat{\vec{P}} - q\vec{A})^2 + q\phi\right)\Psi.}$$

$(\hat{\vec{P}} - q\vec{A})^2$可以进一步展开，这时要注意$\hat{\vec{P}}$和$\vec{A}$一般说是不对易的。事实上，

$$(\hat{\vec{P}}\cdot\vec{A} - \vec{A}\cdot\hat{\vec{P}})\psi = -\mathrm{i}\hbar[\nabla\cdot(\vec{A}\psi) - \vec{A}\cdot\nabla\psi] = -\mathrm{i}\hbar(\nabla\cdot\vec{A})\psi,$$

但是电磁场的势函数可以再满足一些“规范条件”。对于矢势$\vec{A}$经常提出“横波条件”

$$\nabla\cdot\vec{A} = 0,$$

这时$\hat{\vec{P}}$和$\vec{A}$就是对易的了，所以$(\hat{\vec{P}} - q\vec{A})^2$的展开和通常的代数展开一样，Schrödinger 方程可以写为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(\frac{1}{2\mu}\hat{\vec{P}}^2 - \frac{q}{\mu}\vec{A}\cdot\hat{\vec{P}} + \frac{q^2}{2\mu}\vec{A}^2 + q\phi\right)\Psi.$$

7.1.3 经典的和量子的规范不变性

假设电磁场势$\phi, \vec{A}$受到下面的“规范变换”：

$$\boxed{\begin{aligned} &\phi \to \phi' = \phi - \frac{\partial\chi}{\partial t}, \\ &\vec{A} \to \vec{A}' = \vec{A} + \nabla\chi, \end{aligned}}$$

其中χ是任意的时空函数，那么电磁场强E, B是保持不变的：

$$\mathrm{E} \to \mathrm{E}' = -\nabla\phi' - \frac{\partial\vec{A}'}{\partial t} = -\nabla\left(\phi - \frac{\partial\chi}{\partial t}\right) - \frac{\partial}{\partial t}(\vec{A} + \nabla\chi) = -\nabla\phi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} = \mathrm{E},$$

$$\mathrm{B} \to \mathrm{B}' = \nabla\times\vec{A}' = \nabla\times\vec{A} + \nabla\times\nabla\chi = \nabla\times\vec{A} = \mathrm{B}.$$

这称为电磁场的规范变换不变性，简称**规范不变性**。在经典粒子的运动方程中只出现电磁场强E, B，所以它也是规范不变的。但是在量子力学的 Schrödinger 方程中出现的是电磁场势$\phi, \vec{A}$本身，那么它也能保持规范不变性吗？答案是肯定的，条件是让波函数Ψ同时受到变换

$$\Psi \to \Psi' = e^{iq\chi/\hbar}\Psi.$$

证明：

$$i\hbar\frac{\partial\Psi'}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(e^{iq\chi/\hbar}\Psi) = e^{iq\chi/\hbar}\left(i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} - q\frac{\partial\chi}{\partial t}\Psi\right),$$

$$(\hat{\vec{P}} - q\vec{A}')\Psi' = (-i\hbar\nabla - q\vec{A} - q\nabla\chi)(e^{iq\chi/\hbar}\Psi)$$

$$= e^{iq\chi/\hbar}(-i\hbar\nabla + q\nabla\chi - q\vec{A} - q\nabla\chi)\Psi = e^{iq\chi/\hbar}(\hat{\vec{P}} - q\vec{A})\Psi,$$

$$q\phi'\Psi' = e^{iq\chi/\hbar}\left(q\phi\Psi - q\frac{\partial\chi}{\partial t}\Psi\right),$$

所以仍然有

$$i\hbar\frac{\partial\Psi'}{\partial t} = \left(\frac{1}{2\mu}(\hat{\vec{P}} - q\vec{A}')^2 + q\phi'\right)\Psi'. \quad \blacksquare$$

这称为**量子的**规范不变性。

既然电磁场势 $\phi, \vec{A}$ 直接出现在 Schrödinger 方程里，这是不是意味着在量子力学的意义上 $\phi, \vec{A}$ 是可以直接观察的呢？或者说，即使电磁场强 $\vec{\mathrm{E}}, \vec{\mathrm{B}}$ 保持不变，只要电磁场势 $\phi, \vec{A}$ 有改变，就有可观察的物理效应呢？对这个问题的回答是：在量子力学里可观察的是 $\phi, \vec{A}$ 的不可积相因子，它不同于场强 $\vec{\mathrm{E}}, \vec{\mathrm{B}}$，然而也是规范不变量。这个结论已经在 AB 效应(Aharonov-Bohm 效应)的观察中得到了实验的证实。

§7.2 Landau 能级　朗道能级，凝聚态物理

7.2.1 带电粒子在均匀磁场中的经典运动

设沿正 z 轴方向有强度为 B 的均匀磁场，一个质量为 μ，电荷为 q 的带电粒子在 XY 平面内运动，初始速度为 v，那么根据电磁学可知，在 Lorentz 力 $q\dot{\vec{r}}\times\vec{\mathrm{B}}$ 的作用下，电子将沿一个园轨道运动，从 XY 平面的上方（正 z 轴的方向）向下看，$q>0$ 时粒子沿顺时针方向运动，$q<0$ 时沿逆时针方向运动。设粒子在园轨道上的角速度为 $\omega_{\mathrm{c}}=\mathrm{v}/R$，$R$ 是园的半径，那么它的运动方程是

$$q\mathrm{v}B=\mu\omega_{\mathrm{c}}^2R,\quad(\mathrm{v}=\omega_{\mathrm{c}}R)$$

所以

$$\omega_{\mathrm{c}}=\frac{qB}{\mu}.$$

这就是说，ω_{c} 只取决于粒子的荷质比（q/μ）和磁场强度，而与它的速度或轨道半径无关。角频率 ω_{c} 称为粒子的**同步回旋(cyclotron)频率**。

7.2.2 带电粒子在均匀磁场中的量子运动 Landau 能级

不难证明强度为 $\vec{\mathrm{B}}$ 的均匀磁场的矢量势可以取为

$$\vec{A}=\frac{1}{2}\vec{\mathrm{B}}\times\vec{r},$$

这是因为

$$\nabla\times\vec{A}=\frac{1}{2}\nabla\times(\vec{\mathrm{B}}\times\vec{r})=\frac{1}{2}\left(\vec{\mathrm{B}}(\nabla\cdot\vec{r})-(\vec{\mathrm{B}}\cdot\nabla)\vec{r}\right)=\frac{1}{2}(3\vec{\mathrm{B}}-\vec{\mathrm{B}})=\vec{\mathrm{B}},$$

而且

$$\nabla\cdot\vec{A}=\frac{1}{2}\nabla\cdot(\vec{\mathrm{B}}\times\vec{r})=-\frac{1}{2}\vec{\mathrm{B}}\cdot(\nabla\times\vec{r})=0.$$

如果

$$\vec{\mathrm{B}}=\mathrm{B}\vec{e}_z,\quad(\mathrm{B}>0)$$

那么，

$$\vec{A}=\left(-\frac{1}{2}\mathrm{B}y,\ \frac{1}{2}\mathrm{B}x,\ 0\right),$$

设电子在 XY 平面内运动，那么它的 Hamiltonian 算符是（注意 $q=-e$）

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\frac{1}{2\mu}\left[\left(\hat{P}_x-\frac{e\mathrm{B}}{2}y\right)^2+\left(\hat{P}_y+\frac{e\mathrm{B}}{2}x\right)^2\right]\\&=\frac{1}{2\mu}(\hat{P}_x^2+\hat{P}_y^2)+\frac{e^2\mathrm{B}^2}{8\mu}(x^2+y^2)+\frac{e\mathrm{B}}{2\mu}(x\hat{P}_y-y\hat{P}_x)\\&=\frac{1}{2\mu}(\hat{P}_x^2+\hat{P}_y^2)+\frac{1}{2}\mu\omega_{\mathrm{L}}^2(x^2+y^2)+\omega_{\mathrm{L}}\hat{L}_z,\end{aligned}$$

其中

$$\omega_{\mathrm{L}}=\frac{1}{2}\omega_{\mathrm{c}}=\frac{eB}{2\mu}$$

称为拉莫尔(Larmor)频率。

显然，现在的力学量完全集是 $\{\hat{H},\hat{L}_z\}$，适合采用平面极坐标系 (ρ,φ) 求解，并可设

$$\psi(\rho,\varphi)=R(\rho)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}.\quad(m=0,\pm1,\pm2,\cdots)$$

平面极坐标系中的 Laplace 算符是

$$\nabla^2\equiv\partial_x^2+\partial_y^2=\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2},$$

所以把$\psi(\rho,\varphi)$代入能量本征方程中得到径向方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}\right)+\frac{1}{2}\mu\omega_{\rm L}^2\rho^2\right]R=(E-m\hbar\omega_{\rm L})R.$$

在其中做变量代换

$$\xi=\frac{\mu\omega_{\rm L}}{\hbar}\rho^2,\quad(\xi\geq 0)$$

则方程成为

$$\frac{d^2R}{d\xi^2}+\frac{1}{\xi}\frac{dR}{d\xi}-\left[\frac{1}{4}-\frac{1}{2\xi}\left(\frac{E}{\hbar\omega_{\rm L}}-m\right)+\frac{m^2}{4\xi^2}\right]R=0.$$

在$\xi\to\infty$时$R\to{\rm e}^{-\xi/2}$，在$\xi\to 0$时$R\to\xi^{|m|/2}$，所以可设

$$R=u(\xi)\,\xi^{|m|/2}\,{\rm e}^{-\xi/2},$$

代入方程中得到$u(\xi)$需满足

$$\boxed{\xi\frac{d^2u}{d\xi^2}+(|m|+1-\xi)\frac{du}{d\xi}+\frac{1}{2}\left(\frac{E}{\hbar\omega_{\rm L}}-m-|m|-1\right)u=0.}$$

这又是合流超几何方程，它有多项式解的条件是

$$\frac{1}{2}\left(\frac{E}{\hbar\omega_{\rm L}}-m-|m|-1\right)=n_\rho,\quad(n_\rho=0,1,2,\cdots)$$

所以

$$E=(2n_\rho+m+|m|+1)\hbar\omega_{\rm L},\quad(n_\rho=0,1,2,\cdots)$$

或者写为

$$E_N=(N+1)\hbar\omega_{\rm L},\quad(N=2n_\rho+m+|m|=0,2,4,\cdots)$$

如果改用$\omega_{\rm c}=2\omega_{\rm L}$，那么能级又可以写为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_{\rm c},\quad\left(n=n_\rho+\frac{m+|m|}{2}=0,1,2,\cdots\right)$$ Landau能级

它与固有频率为$\omega_{\rm c}$的谐振子能级完全相同。这些能级就称为 Landau 能级。在上述条件下，$u(\xi)$成为缔合 Laguerre 多项式$L_{n_\rho}^{|m|}(\xi)$，所以径向波函数是

$$R_{nm}(\rho)\propto L_{n_\rho}^{|m|}(\xi)\,\xi^{|m|/2}\,{\rm e}^{-\xi/2}.\quad\left(\xi=\frac{\mu\omega_{\rm L}}{\hbar}\rho^2\right)$$

在最简单的情况下可以只考虑最低的 Landau 能级，即对应着$n_\rho=0,\ m=0,-1,-2,\cdots$的那些态，这称为 LLL (Lowest Landau Level) 近似。最低 Landau 能级的波函数有一种非常简明的写法。如果把$\vec{\rm B}$改为沿着$-Z$轴方向，那么能级的表达式仍然是

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_{\rm c},$$

但是其中的n现在变成了

$$n=n_\rho+\frac{|m|-m}{2},$$

所以最低 Landau 能级对应着$n_\rho=0,\ m=0,1,2,\cdots$。让我们记

$$z=\sqrt{\frac{eB}{\hbar}}(x+{\rm i}y)$$

（这是一个无量纲变量），那么最低 Landau 能级的波函数就可以写为（未考虑归一化）

$$\psi_m(z)=z^m\,{\rm e}^{-z^*z/4},$$

其中z^*是z的复共轭。在凝聚态物理中经常采用这种形式的 LLL 波函数。

对于 $\vec{\mathrm{B}}=\mathrm{B}\vec{e}_z$ 的磁场也可以取矢量势 $\vec{A}=(-\mathrm{B}y,\ 0,\ 0)$，这称为 $\vec{A}$ 的 Landau 规范。用它解出的能级是一样的，但是波函数不同。

*7.2.3　Landau 能级的简并度

尽管 Landau 能级的样子看起来和谐振子的能级一样，它们的简并度却完全不同。注意到

$$n=n_\rho+\frac{m+|m|}{2},\quad (n_\rho=0,1,2,\cdots;\ m=0,\pm1,\pm2,\cdots)$$

以及

$$\frac{m+|m|}{2}=\begin{cases}m, & (m>0)\\ 0, & (m\le 0)\end{cases}$$

所以对于给定的 n，一旦 $n_\rho=n$，那么所有的 $m\le 0$ 都是允许的，所以 Landau 能级的简并度是**无穷大**。但是这要假设电子是在无限大的平面内运动。其实在现实的物理实验当中，任何二维电子气体样品的面积都是有限的。设平面的面积为 S，那么可以证明：所有的 Landau 能级的简并度都是

$$g=\frac{eBS}{h},$$

或者写为

$$g=\frac{\Phi}{\Phi_0},$$

其中 $\Phi=BS$ 是整个平面内的总磁通，而

$$\Phi_0=\frac{h}{e}=4.135667\times10^{-15}\ \mathrm{Wb},\quad (\mathrm{Wb}=\mathrm{V\cdot s})$$

是磁通量的量子化单位，也称为 Dirac 的单位磁荷。换句话说，单位面积上的能级简并度是

$$\boxed{g_0=\frac{g}{S}=\frac{eB}{h}.}$$

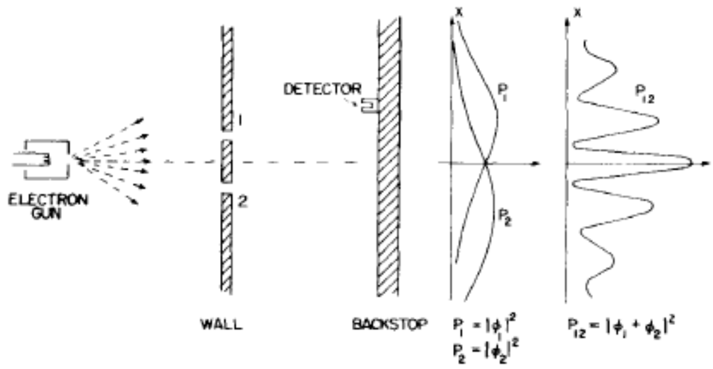
这个结果与凝聚态物理的一系列问题有非常紧密的联系，比如分析量子 Hall 效应，分析 type-II 超导体中的磁通钉扎，等等。

*§7.3　阿哈罗诺夫-博姆(Aharonov-Bohm)效应

*7.3.1 费曼(Feynman)的路径振幅

Feynman 从另一个角度阐述了量子力学的基本概念（参看 Feynman Lectures on Physics, Volume 3, Chapter 1 to Chapter 4）。 费曼物理学讲义

考虑电子的双缝干涉实验。



在量子力学里，“电子从电子枪 s 出发而后在屏上的 x 处被发现”这个事件是用它的几率振幅来描写的，振幅的模平方给出几率，Feynman称它为“量子力学的第一个原理”。Feynman把这个几率振幅记为

$$\langle x|s\rangle,$$

其中$|s\rangle$的意思是粒子离开 s 点，$\langle x|$的意思是粒子到达 x 点，$\langle x|s\rangle$就表示从$|s\rangle$到$\langle x|$的几率振幅，它是一个复数。在双缝干涉实验中，如果两个缝都是打开的，那么电子既可能通过缝1也可能通过缝2，它最后到达 x 点的振幅是这两种路径的振幅之和，即

$$\langle x|s\rangle_{\text{both open}}=\langle x|s\rangle_{\text{via 1}}+\langle x|s\rangle_{\text{via 2}}.$$

Feynman 把它总结为“量子力学的第二个原理”：如果一个粒子可以经由两条不同的路径从给定的初态到达给定的末态，那么这个过程的总几率振幅等于两条路径分别的几率振幅之和。进一步考虑$\langle x|s\rangle_{\text{via 1}}$，这个过程可以看作是两步完成的：粒子先从点 s 到达缝1，然后再从缝1到达点 x。Feynman 为此引入了“量子力学的第三个原理”：把某个选定的路径分成先后两段，则粒子沿该路径的几率振幅等于那两段路径分别的几率振幅之积。对于$\langle x|s\rangle_{\text{via 1}}$，这个原理可以表达为

$$\langle x|s\rangle_{\text{via 1}}=\langle x|1\rangle\langle 1|s\rangle,$$

其中$\langle 1|$代表粒子到达缝1，$|1\rangle$代表粒子离开缝1。把上面的原理综合起来，我们就有

$$\boxed{\langle x|s\rangle_{\text{both open}}=\langle x|1\rangle\langle 1|s\rangle+\langle x|2\rangle\langle 2|s\rangle.}$$

这个公式很好地解释了电子双缝干涉实验的结果。把这些原理推广到一般情形，就得到了 Feynman 的量子力学的路径积分形式(Path Integral Formulism)。可以证明：量子力学的路径积分形式和前面介绍的量子力学的正则形式是等价的。

所以，尽管量子力学里的几率和经典几率在观察的意义上是一样的，但是在量子力学里基本的运算是对几率振幅进行的，而在概率论里基本的运算是对几率本身进行的。在这个意义上，量子力学的概率和经典的概率有**质的区别**。

*7.3.2 无限长螺线管的矢量势

考虑一条无限长螺线管，其轴线与 Z 轴重合。假设它通电以后在螺线管内产生磁通Φ_s，方向沿Z轴正向，这时在螺线管外磁场强度$\mathrm{B}\equiv 0$，然而矢量势 $\vec{A}\neq 0$。根据对称性采用柱坐标系(ρ,φ,z)，那么在螺线管外的 $\vec{A}$ 处处沿着 $\vec{e}_\varphi$ 方向，其大小由公式

$$\oint_L \vec{A}\cdot d\vec{l}=\int_S(\nabla\times\vec{A})\cdot d\vec{s}=\int_S \vec{\mathrm{B}}\cdot d\vec{s}=\Phi_s$$

来决定，结果是

$$|\vec{A}|=\frac{\Phi_s}{2\pi}\frac{1}{\rho},$$

所以

$$\vec{A}=\frac{\Phi_s}{2\pi}\frac{1}{\rho}\vec{e}_\varphi,$$

这个 $\vec{A}$ 使螺线管外的 $\vec{\mathrm{B}}=\nabla\times\vec{A}=0$。证明：在柱坐标系里，若 $\vec{f}=f_\rho\vec{e}_\rho+f_\varphi\vec{e}_\varphi+f_z\vec{e}_z$，那么

$$\nabla\times\vec{f}=\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial f_z}{\partial\varphi}-\frac{\partial f_\varphi}{\partial z}\right)\vec{e}_\rho+\left(\frac{\partial f_\rho}{\partial z}-\frac{\partial f_z}{\partial\rho}\right)\vec{e}_\varphi+\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial(\rho f_\varphi)}{\partial\rho}-\frac{1}{\rho}\frac{\partial f_\rho}{\partial\varphi}\right)\vec{e}_z,$$

所以

$$\nabla\times\left(\frac{1}{\rho}\vec{e}_\varphi\right)=-\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{\rho}\right)\vec{e}_\rho+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{1}{\rho}\right)\vec{e}_z=0.$$

*7.3.3 Aharonov-Bohm(AB)效应和不可积相因子

如果一个带电粒子在磁场中运动，那么 Feynman 的路径振幅会受到什么影响？对照带电粒子在电磁场中的 Schrödinger 方程，这个振幅将被修正为

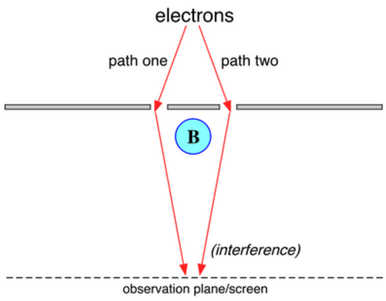
$$\langle b|a\rangle_{\text{in }\vec{A}}=\langle b|a\rangle_{\vec{A}=0}\cdot\exp\left(\mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\int_a^b\vec{A}\cdot d\vec{l}\right),$$

其中 a,b 分别代表路径的起点和终点，q 是粒子的电荷，$\vec{A}$ 是磁场的矢量势。所以，磁场的存在给几率振幅贡献了一个与 $\vec{A}$ 的路径积分 $\int_a^b\vec{A}\cdot d\vec{l}$ 有关的**相位因子**。

现在考虑右图所示的实验。这是一个典型的电子双缝干涉实验，但是在缝的后面增加了一个无限长螺线管。如果没有那个螺线管，实验的结果是我们熟知的：电子将在观察屏上产生干涉条纹，因为

$$\langle x|s\rangle_{\text{total}}=\langle x|s\rangle_{\text{path 1}}+\langle x|s\rangle_{\text{path 2}},$$

s 代表电子源，x 代表观察屏上点的位置，$\langle x|s\rangle_{\text{path 1}}$ 和 $\langle x|s\rangle_{\text{path 2}}$ 之间的位相差随 x 的变化导致了干涉的产生。然后考虑螺线管的作用。如前所述，在螺线管外 $\vec{\mathrm{B}}\equiv 0$，所以电子的路径不受影响，但是 $\vec{A}\neq 0$，而且



$$\oint_L\vec{A}\cdot d\vec{l}=\Phi_s.$$

现在我们把环路 L 取为 path 1 加上反向的 path 2，那么它所包围的磁通就是螺线管内的磁通 Φ_s（设 $\vec{\mathrm{B}}$ 的方向是从纸面向外），所以

$$\int_{\text{path 1}}\vec{A}\cdot d\vec{l}-\int_{\text{path 2}}\vec{A}\cdot d\vec{l}=\Phi_s,$$

这样一来我们就有（代入 $q=-e$）

$$\langle x|s\rangle_{\text{total}}=\langle x|s\rangle_{1,\,\vec{A}=0}\cdot\exp\left(-\mathrm{i}\frac{e}{\hbar}\int_{\text{path 1}}\vec{A}\cdot d\vec{l}\right)+\langle x|s\rangle_{2,\,\vec{A}=0}\cdot\exp\left(-\mathrm{i}\frac{e}{\hbar}\int_{\text{path 2}}\vec{A}\cdot d\vec{l}\right),$$

所以 $\langle x|s\rangle_{\text{path 1}}$ 和 $\langle x|s\rangle_{\text{path 2}}$ 的**相位差**在原来的基础上**增加**了

$$\frac{e}{\hbar}\left(\int_{\text{path 1}}\vec{A}\cdot d\vec{l}-\int_{\text{path 2}}\vec{A}\cdot d\vec{l}\right)=\frac{e\Phi_s}{\hbar},$$

这使得观察屏上的电子干涉条纹发生了与 Φ_s 的大小有关的周期性移动，对应的 Φ_s 的周期是

$$\Delta\Phi_s=2\pi\frac{\hbar}{e}=\frac{h}{e}\equiv\Phi_0\approx 4\times10^{-15}\ \mathrm{V\cdot s}.$$

这个现象就称为Aharonov-Bohm(AB)效应，$\Phi_0=h/e$ 称为磁通量的量子单位。所以，在量子力学的意义上，磁场的规范不变的可观察量，在磁场强度 $\vec{\mathrm{B}}$ 之外还有 $\exp\left(\mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\int\vec{A}\cdot d\vec{l}\right)$，这个量称为**不可积相因子**。实验已经完全证实了以上的分析。

与此有关的另一类现象是超导体环中的磁通量子化和 II 型超导体中的磁通钉扎，由于它还涉及到超导体的一系列问题，限于篇幅就不仔细介绍了。

維基百科

路徑積分表述

维基百科，自由的百科全书

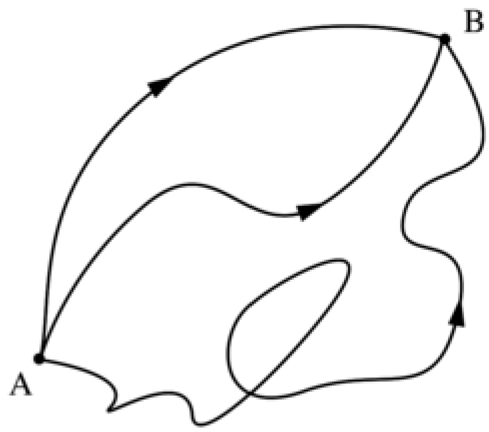
量子力學和量子场论的**路徑積分表述**（英語：**path integral formulation**或**functional integral**）是一個從經典力學裡的作用原則延伸出來對量子物理的一種概括和公式化的方法。它以包括两點間所有路徑的和或泛函積分而得到的量子幅來取代經典力學裡的單一路徑。

路径积分表述的基本思想可以追溯到諾伯特·維納，他介绍的维纳积分解决扩散和布朗运动的问题[1]。在1933年他的论文中，由保罗·狄拉克把这个基本思想被扩展到量子力学中的利用拉格朗日算符[2][3]。路徑積分表述是理論物理學家理查德·費曼在1948年發展出來。一些早期結果是在约翰·惠勒指导下的費曼的博士论文中在早些时候已经被摸索出。

因爲路徑積分的表述法顯然地把時間和空間同等處理，它成為以後理論物理學發展的重要工具之一。

路徑積分表述也把量子現像和随機現像联系起來。為1970年代量子場論和概括二級相變附近序參數波動的統計場論統一奠下基礎。薛定諤方程式是虛擴散系數的擴散方程，而路徑積分表述是把所有可能的随機移動路徑加起來的方法的解析延拓。因此路徑積分表述在應用於量子力學前，已經在布朗運動和擴散問題上被應用。

目录



这些只是对于粒子在某个时间t_0从点A移动到在某个其它时间t_1的点B的量子幅度有贡献的三个路径。

數學方法

哈密頓算符在量子力學中的意義

哈密頓算符H是量子力學中的時間演化算符$U(t_b, t_a)$的生成算符：

$$U(t_b, t_a) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t_b - t_a)H}$$

一個量子粒子在時刻t_a到t_b間從位置x_a運動到x_b的量子概率幅是：

$$iG(x_b, t_b; x_a, t_a) \equiv \langle x_b | \, U(t_b, t_a) \, | x_a \rangle$$

因爲$U(t_b, t_a)$是很複雜的算符函數，直接用以上定義計算$iG(x_b, t_b; x_a, t_a)$非常困難。 時間演化算符符合

$$U(t_b, t_a) = U(t_b, t) U(t, t_a)$$

因此量子幅符合

$$iG(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int dx iG(x_b, t_b; x, t) iG(x, t; x_a, t_a)。$$

此公式的物理理解為：從(t_a, x_a)出發，在時刻$t_b > t > t_a$先穿過位置x再到達(t_b, x_b)路徑的總量子幅是兩段路徑量子幅的積；而從(t_a, x_a)到(t_b, x_b)的量子幅是所有這種路徑的和。

時間切片

假設粒子在時刻t_a到t_b間從位置x_a運動到x_b。那可以把之間的時間平均分割成個別的時間區間：$t_a = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_{n-1} < t_n = t_b$。每一段的時間是$\Delta = \dfrac{t_b - t_a}{n}$。 在時刻$t_{j-1}$和$t_j$間粒子的量子幅是：

$$\left\langle x_j \left| e^{-i\frac{\Delta}{\hbar} H(\hat{p}, \hat{x})} \right| x_{j-1} \right\rangle = \int dp_j \langle x_j | p_j \rangle \left\langle p_j \left| e^{-i\frac{\Delta}{\hbar} H(\hat{p}, \hat{x})} \right| x_{j-1} \right\rangle$$

因為$\hat{p}$和$\hat{x}$是互不交換的算符，所以必須運用它們的交換子關係：$[\hat{p}, \hat{x}] = i\hbar$把$H(\hat{p}, \hat{x})$修成所有的$\hat{p}$在$\hat{x}$左方的正常順序：

$$e^{-i\frac{\Delta}{\hbar} H(\hat{p}, \hat{x})} =: e^{-i\frac{\Delta}{\hbar} H(\hat{p}, \hat{x})} : + O(\Delta^2)$$

做時間切片的作用是：當取切片數趨向無限大的极限時（$\Delta \to 0$），原本非正常順序的哈密頓算符可以以正常順序版代替。在正常順序算符下，$\hat{p}$和$\hat{x}$從算符簡化成普通複數。 因此

$$\begin{aligned}\left\langle x_j \left| e^{-i\frac{\Delta}{\hbar} H(\hat{p}, \hat{x})} \right| x_{j-1} \right\rangle &= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{i\frac{p_j}{\hbar}(x_j - x_{j-1})} \, e^{-i\frac{\Delta}{\hbar} H(p_j, x_{j-1})} \\ &= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} e^{i\frac{\Delta}{\hbar}\left(p_j \frac{x_j - x_{j-1}}{\Delta} - H(p_j, x_{j-1})\right)}\end{aligned}$$

把所有連接(t_a, x_a)和(t_b, x_b)的路徑相加得到的總量子幅是：

$$\begin{aligned}iG(x_b, t_b; x_a, t_a) &= \int dx_1 \cdots dx_{n-1} \prod_{i=1}^{n-1} dp_i \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{n-1} \Delta \, L\left(t_j, \frac{x_j + x_{j-1}}{2}, \frac{x_j - x_{j-1}}{\Delta}\right)\right] \\ &= \int \mathcal{D}\left[x(t)\right] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}\end{aligned}$$

S是路徑$x(t)$的作用量，拉格朗日量$L(t, x, \dot{x})$的時間積分：

$$S = \int L(t, x, \dot{x}) dt$$

简單例子

自由粒子

自由粒子的作用量（$m = 1$，$\hbar = 1$）：

$$S = \int \frac{\dot{x}^2}{2} dt$$

可以插入路徑積分裡做直接計算。 暫時把指數函數内i去掉可容許比較簡易的理解計算。以後可以用威克轉動回到原式：

$$G(x-y;T) = \int_{x(0)=x}^{x(T)=y} e^{-\int_0^T \frac{\dot{x}^2}{2} dt} \mathcal{D}x = \int_{x(0)=x}^{x(T)=y} \prod_t e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{(x(t+\epsilon)-x(t)}{\epsilon}\right)^2 \epsilon} \mathcal{D}x$$

$\mathcal{D}x$是以上時間切成有限片的積分。連乘裡每一項都是平均值為$x(t)$方差為c的高斯函數。多重積分是相鄰時間高斯函數G_ϵ的卷積：

$$G(x-y;T) = G_\epsilon * G_\epsilon * G_\epsilon \cdots G_\epsilon$$

這裡面共包含T/ϵ個卷積。傅里葉變換下卷積變成普通乘積：

$$\tilde{G}(p;T) = \tilde{G}_\epsilon(p)^{T/\epsilon}$$

高斯函數的傅里葉變換也是一個高斯函數：

$$\tilde{G}_\epsilon(p) = e^{-\epsilon \frac{p^2}{2}}$$

因此

$$\tilde{G}(p;T) = e^{-T\frac{p^2}{2}}$$

反傅里葉變換可以得到實空間量子幅：

$$G(x-y;T) \propto e^{-\frac{(x-y)^2}{2T}}$$

時間切片方法原則上不能决定以上比例系數。以随機運動概率來理解可得到以下正規条件：

$$\int G(x-y;T) dy = 1$$

從這條件可得到擴散方程：

$$\frac{d}{dt} G(x;t) = \frac{\nabla^2}{2} G$$

回到振盪軌道，即恢複分子裡的原本的i。這可同樣得到一系列高斯函數的卷積。但這些高斯積分是嚴重振盪積分而要小心計算。一個普遍方法是讓時間片ϵ帶一個小虛部。這等同於以威克轉動在實時間和虛時間間轉換。在這些處理下可得到傳播核：

$$G(x-y;T)\propto e^{\frac{i(x-y)^2}{2T}}$$

運用和之前一樣的正規條件，重新得到自由粒子的薛定諤方程式：

$$\frac{d}{dt}G(x;t)=\frac{i\nabla^2}{2}G$$

這意味著任何G的綫性組合也符合薛定諤方程式，包括以下定義的波函數：

$$\varphi_t(x)=\int\varphi_0(y)G(x-y;t)dy$$

和G一樣服從薛定諤方程式：

$$i\frac{d}{dt}\varphi_t=-\frac{\nabla^2}{2}\varphi_t(x)$$

量子场论

配分函数成为泛函积分：

$$Z=\int D\phi\ \exp(iS(\phi))$$

费米子路径积分

费米积分、格拉斯曼數

参看

- 费曼－卡茨公式
- 配分函数
- 泛函
- 高斯积分

参考资料

1. Chaichian, Masud; Demichev, Andrei Pavlovich. Introduction. Path Integrals in Physics Volume 1: Stochastic Process & Quantum Mechanics. Taylor & Francis. 2001: 1ff. [2016-10-21]. ISBN 0-7503-0801-X. （原始内容存档于2019-05-02）.
2. Dirac, Paul A. M. The Lagrangian in Quantum Mechanics (PDF). Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion. 1933, **3**: 64–72 [2016-10-21]. （原始内容存档 (PDF)于2017-01-14）.
3. Van Vleck, John H. The correspondence principle in the statistical interpretation of quantum mechanics. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America.