

在穿有磁通的环上运动的带电粒子

岳亘

2021 年 12 月

摘要

本文的受众为非物理系学生以及低年级本科生。文章将简要介绍量子力学的基本原理，并给出一个如标题的简单的例子，用来介绍物理上非常关心的三个问题：拓扑相位，量子反常和自发对称性破缺。

1 量子力学简介

量子力学作为一个物理理论，总是有一些被认为是“公理”的东西存在的。虽然从历史上来看，物理学家发现并总结它们经历了大量实验和无数模糊的 arguments，但我们这里只是把它们作为公理给呈现出来。当然要注意的是，在物理学中，“公理”往往可以被更先进的理论“证明”，物理学的学习不是一个逻辑链，而是一张逻辑网，对一个物理定义或物理定理的理解会在各种不同的情境中被逐渐加深，在这里我们只是给出苍白的数学定义用于读者的入门。

1.1 量子力学的基本公理和定义

这些公理和定义如下：

(1) 一个量子力学系统由一个希尔伯特空间 \mathcal{H} 里的向量 $|\psi\rangle$ 来描述。我们把 $|\psi\rangle$ 称为一个量子态。希尔伯特空间上有内积的结构，两个量子态 $|\psi\rangle$ 和 $|\phi\rangle$ 的内积记为 $\langle\psi|\phi\rangle$ 。如果两个态只差一个 $U(1)$ 系数： $|\phi\rangle \sim |\psi\rangle \Leftrightarrow |\phi\rangle = e^{i\theta}|\psi\rangle$, $\theta \in \mathbb{R}$, 那么我们称它们是物理上等价的。通常我们认为量子态是归一化的： $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ 。

(2) 一个物理学可观测量 A 是一个厄密算符: $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. 对 A 的观测会得到某个 A 的本征值 (注意到厄米算符的本征值是实数)。这里要强调一下, 在量子力学中, 位置是可观测量, 即存在位置算符这种东西, 但时间是作为参数存在的。这种时空地位的不等价性会带来量子力学与相对论的不相容。

(3) 对 A 的测量满足以下原则: 假设测量之前系统处于 $|\psi\rangle$, A 作为厄米算符其本征态 $|a\rangle$ 可以取作一组归一化的完备正交基, $|\psi\rangle$ 在这组基上的展开为: $|\psi\rangle = \sum_a c_a |a\rangle$, 叠加系数为 c_a , $c_a = \langle a|\psi\rangle$, 称为概率幅。由于态 $|\psi\rangle$ 的归一化条件和 $\{|a\rangle\}$ 的正交条件, 可以得到 $\sum_a |c_a|^2 = 1$. 对 A 进行测量之后, 我们得到测量结果为 a 的概率为 $|c_a|^2$, 且在依概率得到测量结果的瞬间, 量子态由 $|\psi\rangle$ 变成相应的 $|a\rangle$ 。这被称为量子态的坍缩。如果我们对一个算符多次测量, 或者系统内含有处于相同的态上的诸多粒子, 可以得到测量结果的平均值:

$$\langle A \rangle = \sum_a a |c_a|^2 = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (1)$$

这种对量子态以及测量的概率解释就是大名鼎鼎的“哥本哈根诠释”。

(4) 在不进行测量时, 量子态会遵循薛定谔方程随时间演化:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (2)$$

这里 \hbar 是约化普朗克常数, H 是哈密顿量, 是该系统的能量算符, 我们会在之后给出详细的解释。我们假设时间为 t 的态 $|\psi(t)\rangle$ 是由时间为 t_0 的态 $|\psi(t_0)\rangle$ 经历了时间演化得到的:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (3)$$

$U(t, t_0)$ 为从 t_0 到 t 的时间演化算符。薛定谔方程本质上是在求解时间演化算符, 容易证明, 在哈密顿量不含时时 (这个 note 中我们只关心不含时的情况), 时间演化算符是么正的:

$$U(t, t_0) = e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)} \quad (4)$$

到此为止读者也许已经被震惊了, 这真的是物理学么? 回顾经典力学, 经典电磁学, 我们都会觉得是那么自然, 可以清楚的想象一些粒子以某种方式运动等。然而到了量子力学, 世界就突然变得抽象了起来, 其数学语言也变成了线性代数 (群表示论) 而非直观的微积分。量子力学难以理解的本质原因及核心问题正是其缺少某种几何直观, 当物理学家谈论诸如“波粒二象性”的时候, 他们并不真的知道自己在谈论什么, 只是强行的把经典力学中的概念拿

来类比，以图像化自己的思维。我想真正的“量子几何”，作为新的数学，还没有被发明出来，当它问世的时候，可能也是当今众多物理学最重要的难题如量子引力问题，强关联强纠缠的量子多体问题被人们真正理解的时候。这还需要数学家与物理学家的一起努力。

回到正题。我们在第一条公理 (定义) 中提到了“量子力学系统”。那么何为一个量子力学系统？从还原论的角度看，任何物理系统都应该是量子力学系统，其经典力学描述应该是某种宏观近似。但实际地来讲，我们往往是把一个经典力学系统“量子化”来得到量子力学系统。显然，并不是所有量子力学自由度都能从量子化得来，比如我们知道基本粒子有自旋，自旋是粒子内禀的量子力学自由度，没有经典的物理量与之对应。

在量子化一个经典力学系统之前，我们来简单的回顾一下经典力学。

1.2 经典力学回顾

首先我们介绍经典力学的拉格朗日表述：

一个经典力学系统由拉格朗日量 $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ 描述，它是广义坐标 q_i 和广义速度 \dot{q}_i (一般情况下也是时间) 的函数。通常情况下，拉氏量具有“动能 - 势能”的形式，比如单粒子在势场 $V(q)$ 下，拉氏量为：

$$L = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - V(q) \quad (5)$$

给定任意一条路径 $q_i(t)$ ，注意这条路径未必是真实发生的，可以定义作用量：

$$S[q] = \int dt L(q(t), \dot{q}(t), t) \quad (6)$$

而物理允许发生的路径是使得作用量最小的那条路径。这即是最小作用量原理，它在经典力学中是作为公理给出的。这条物理的路径满足欧拉-拉格朗日方程：

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \quad (7)$$

读者可以拿一些简单的例子自行验证，这正是牛顿第二定律。注意：如果给拉氏量加上任意一个时间全导数项，作用量只会相差一个只与出末位置有关常数，因此不影响经典路径。即

$$L \sim L + \frac{d}{dt} f(q, \dot{q}, t) \quad (8)$$

对于一个在磁场中运动的带电粒子，假设其电荷量为 Q ，磁场的矢势为 $\mathbf{A}(\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B})$ ，那么其拉氏量为：

$$L = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + Q\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) \quad (9)$$

作为必做的练习，请读者验证其经典运动方程为：

$$m\dot{\mathbf{v}} = Q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (10)$$

接下来介绍经典力学的哈密顿表述：

定义正则动量：

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (11)$$

那么有哈密顿量：

$$H(p, q, t) = (p_i \dot{q}_i - L)|_{p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}} \quad (12)$$

哈密顿量对应着是系统的能量，读者可以验证，对于 (3) 式提到的拉氏量，其哈密顿量为

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (13)$$

即动能加势能。经典路径的 $p_i(t), q_i(t)$ 满足哈密顿正则方程：

$$\begin{aligned} \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} \\ \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \end{aligned} \quad (14)$$

读者可以自行验证，这同样也是牛顿第二定律。对于一个在磁场中运动的带电粒子，假设其电荷量为 Q ，磁场的矢势为 \mathbf{A} ($\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$)，那么其哈密顿量为：

$$H = \frac{(\mathbf{p} - Q\mathbf{A}(\mathbf{x}))^2}{2m} \quad (15)$$

作为必做的练习，证明正则方程与牛顿第二定律等价。

定义任意的物理学量 $A(p, q)$ $B(p, q)$ 之间的泊松括号：

$$\{A, B\} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} - \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} \right) \quad (16)$$

那么有：

$$\begin{aligned} \{q_i, p_j\} &= \delta_{ij} \\ \{q_i, q_j\} &= 0 \\ \{p_i, p_j\} &= 0 \end{aligned} \quad (17)$$

此外，利用正则方程可以推出任何一个物理量的时间演化满足的方程：

$$\frac{d}{dt} A(p, q, t) = \{H, A\} + \frac{\partial}{\partial t} A(p, q, t) \quad (18)$$

这被称为泊松方程。

1.3 路径积分量子化

接下来我们介绍如何如何将一个经典力学系统量子化为一个量子力学系统。首先来介绍一种自然的方法：路径积分量子化。

路径积分的想法最早来源于费曼对双缝干涉的思考。我们知道将一个个单光子射向双缝，在双缝后的光屏上可以看到光的干涉图像。费曼的想法不同于通常物理学家的“光的波动说”，他认为量子力学世界的粒子也许真的是**同时**通过了双缝。量子力学的粒子并不是走使得作用量最小的经典路径，而是有可能走所有的路径，直到你测量它时，再依概率坍缩到一个确定的位置。假设在 t_0 时刻刚发射光子处于位置本征态 $|x_0\rangle$ ，经历了 $t - t_0$ 的时间演化后，我们测量它的位置，那么测到其位置在 x 处的概率幅为：

$$K(x, t; x_0, t_0) = \langle x | e^{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)} | x_0 \rangle \quad (19)$$

这也称为从 (x_0, t_0) 到 (x, t) 的传播子。

费曼给出了路径积分量子化的表达式：

$$K(x, t; x_0, t_0) = \int_{x(t_0)=x_0}^{x(t)=x} \mathcal{D}[x(t)] e^{i\frac{S[x(t)]}{\hbar}} \quad (20)$$

等式的右边的积分的积分变量是**所有路径**，每条路径给传播子的贡献是 $e^{i\frac{S}{\hbar}}$ ， S 是该路径对应的作用量。等式左边是量子力学量，而等式右边是经典力学量，因此这被称为是一种“量子化”。

积分测度 $\mathcal{D}[x(t)]$ 通常是根据差分定义的，对于 d 维欧式空间的路径积分，有

$$\int \mathcal{D}[x] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i(t-t_0)} \right)^{\frac{Nd}{2}} \int \prod_{n=1}^{N-1} d^d \mathbf{x}_n \quad (21)$$

数学家也许要崩溃了，这个测度是良定义的么？事实上在一些情况下确实不是，不过这个 note 中我们并不会涉及任何具体路径积分的计算。物理学家会算的路径积分只有高斯型积分。

这里要强调的是，路径积分量子化是一种“公理”，本质上是不能被证明的。但我们可以证明其他形式的量子化与之等价。至于其正确性，自然是被实验验证的。物理学最不平凡的地方正是这些空降的表达式，而之后的逻辑推导反而是相对平凡的。

我们把初末位置相同的路径积分称为生成函数，有些地方也叫它配分函数，即：

$$Z = \int_{x(t_0)=x_0}^{x(t)=x_0} \mathcal{D}[x(t)] e^{i\frac{S[x(t)]}{\hbar}} \quad (22)$$

配分函数可以给出物理系统全部的信息。

1.4 正则量子化

现在我们再来看正则量子化。正则量子化是从哈密顿形式的经典力学出发做量子化，其形式简单粗暴：把两个经典力学量的泊松括号映射到他们对应的量子力学算符的对易子。具体来说：

$$\{A, B\} \Leftrightarrow \frac{1}{i\hbar}[A, B] \quad (23)$$

这里 $[A, B] = AB - BA$.

于是有以下关系：

$$\begin{aligned} [q_i, p_j] &= i\hbar\delta_{ij} \\ [q_i, q_j] &= 0 \\ [p_i, p_j] &= 0 \end{aligned} \quad (24)$$

正则量子化与路径积分量子化在一定程度上是等价的，他们可以相互推出彼此。不过两种量子化的方式都存在一些问题，实际上到目前为止都没有一种完美的量子化方案。

1.4.1 表象与表象下的算符

抽象的算符利于做代数运算，但计算具体的数值，我们还需要更利于操作的语言。对于量子态 $|\psi\rangle$ ，定义其在可观测量 A 表象下的波函数为：

$$\psi(a) = \langle a|\psi\rangle \quad (25)$$

这里 $A|a\rangle = a|a\rangle$. 我们定义在 A 表象下的 O 算符 O_A ：

$$\langle a|O|\psi\rangle = O_A(\langle a|\psi\rangle) \quad (26)$$

这里留一个练习：证明算符的对易关系与表象无关。

于是坐标表象下的波函数（以后在不加限时，波函数特指坐标表象下的波函数）为 $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ 。在坐标表象下，可以证明（留作练习）动量算符为：

$$p_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \quad (27)$$

于是动量算符的本征波函数为：

$$\psi_p(x) \propto e^{i\frac{p}{\hbar}x} \quad (28)$$

坐标表现下的单粒子薛定谔方程为：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x, t) + V(x)\psi(x, t) \quad (29)$$

1.5 对称性

对称性是物理学最关心的话题，甚至没有之一。对称性的含义是指**物理系统在某种操作下保持不变**。对于经典力学，物理系统不变即指拉氏量在某种操作下至多差一个时间全导数，或者作用量至多差一个只和初末位置有关的常数。

关于经典力学的对称性有一条极为重要的定理，诺特定理：

一个连续的对称性一定对应着一个守恒量。

这里由于时间原因我们不予证明，但可以举一些耳熟能详的例子：能量守恒是由于时间平移对称性，动量守恒是由于空间平移对称性，角动量守恒是由于空间旋转对称性...

对于量子力学，在路径积分量子化中，物理系统的对称性除了满足于经典力学对称性的要求之外，还要求**配分函数不变**。因此有些经典力学的对称性放在量子力学中就被违背了，这种现象被称为量子反常。

在正则量子化中，对称性的描述稍微复杂一些。我们知道一个群可以描述一系列操作，我们希望这些操作能作用在物理系统/量子态上。于是自然的我们希望去做群在量子系统处于的希尔伯特空间中的表示，考虑到量子态的归一性，我们要求物理的表示是 unitary 的，再考虑到量子态的相位模糊性，我们允许投影表示的存在。假设我们关心的操作构成群 G ，那么：

$$\begin{aligned} U : G &\longrightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}) \\ g &\mapsto U(g) \\ U(g_1)U(g_2) &= e^{i\omega(g_1, g_2)}U(g_1, g_2) \end{aligned} \tag{30}$$

$$\omega(g_1, g_2) \in \mathbb{R}$$

我们说量子力学系统具有对称性 G ，即是说其 **(投影) 表示与哈密顿量对易**：

$$[U(g), H] = 0, \forall g \in G \tag{31}$$

下面我们来理解这这样定义的含义。拿空间旋转操作举例，空间旋转操作构成了 $SO(3)$ 群，我们知道 $SO(3)$ 的李代数满足： $[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk}L_k$ ，这些元素是李群的生成元，他们在希尔伯特空间中的表示对应了量子力学中的可观测量，这里即角动量算符。于是绕 z 轴旋转的 $SO(3)$ 群元的 unitary 表示为：

$$D_z(\theta) = e^{-i\frac{L_z}{\hbar}\theta} \tag{32}$$

如果 $[D_z(\theta), H] = 0$ ，那么 $[D_z(\theta), U(t, t_0)] = 0$ ， $U(t, t_0)$ 为之前定义的时间演化算符。假设我们有量子态 $|\psi\rangle$ ，那么有

$$D_z(\theta)U(t, t_0)|\psi\rangle = U(t, t_0)D_z(\theta)|\psi\rangle \quad (33)$$

即先旋转再时间演化，和先时间演化再旋转的结果是一样的。此外，如果计算算符 L_z 的平均值随时间的演化，有

$$\langle\psi|L_z|\psi\rangle \longrightarrow \langle\psi|U^\dagger L_z U|\psi\rangle = \langle\psi|L_z|\psi\rangle \quad (34)$$

即，当系统有对称性时， $\frac{d}{dt}\langle L_z \rangle = 0$ ，系统的角动量守恒，这与经典力学的诺特定理是对应的。事实上，对于任意不含时的物理量 O ，我们都有海森堡运动方程：

$$i\hbar \frac{d}{dt}\langle O \rangle = \langle [O, H] \rangle \quad (35)$$

这与经典力学的泊松方程是对应的。

2 模型

2.1 作为经典力学系统

2.2 作为量子力学系统：拓扑相位，量子反常与自发对称性破缺