

现代物理基础丛书

37

量子物理新进展

梁九卿 韦联福 著



科学出版社

内 容 简 介

本书第1章介绍规范变换、正则量子化和经典量子对应。第2~4章从规范场的观点统一论述 Aharonov-Bohm 效应, 自旋-轨道耦合动力学, Berry 相因子及其应用; 揭示 Dirac 磁单极, 超导体 Josephson 效应和量子态拓扑相因子的关系; Aharonov-Casher 相位则成为非 Abel 规范场量子力学模型的一个特例。第5~6章介绍路径积分, 量子隧穿的瞬子方法及在分子磁体宏观量子效应中的应用; 超对称量子力学, 孤子(瞬子)稳定性及涨落方程。第7章阐述绝热逻辑门量子计算方案, 帮助读者理解 Shor 量子算法的基本思想及其运行过程。第8章介绍用超导电路的量子调控验证量子非局域关联的方法。

本书适用于物理等相关专业的研究人员、教师、研究生和本科高年级学生。

图书在版编目(CIP)数据

量子物理新进展/梁九卿, 韦联福著. —北京: 科学出版社, 2011

(现代物理基础丛书; 37)

ISBN 978-7-03-032205-0

I. ①量… II. ①梁… ②韦… III. ①量子论-高等学校-教材 IV. ①O413

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011) 第 175309 号

责任编辑: 刘凤娟 / 责任校对: 张凤琴

责任印制: 钱玉芬 / 封面设计: 陈 敬

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

装 订 厂 印 刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2011 年 8 月第 一 版 开本: B5 (720×1000)

2011 年 8 月第一次印刷 印张: 13 1/2

印数: 1—2 000 字数: 245 000

定价: 49.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前 言

从 1999 年开始, 梁九卿教授就在山西大学给物理国家基地班本科四年级和研究生讲授“量子物理新进展”和“凝聚态场论方法”两门课程。开设此课程的初衷是帮助学生由课堂学习向研究工作过渡, 因为从教科书学习到阅读文献进入研究课题, 学生的知识和能力一般都会存在一个断档, 常常要有一段较长时间的摸索和训练过程。书稿的前六章基本上是根据这些年授课的讲义整理而成, 后两章则基于西南交通大学韦联福教授的研究。本书的写作深受张礼和葛墨林两位先生合著的《量子力学的前沿问题》(清华大学出版社) 的启迪, 该书全面地介绍了近年来量子力学的研究进展, 是对研究人员和高校师生都十分有用的参考书。

量子力学是支配物质世界运动和变化规律的基本法则, 而描述宏观现象的经典力学一般来说只是量子力学在宏观尺度下的近似。通常宏观系统的量子效应并不显著, 但在特定的系统中量子现象也可在宏观尺度下表现出来, 称为宏观量子效应。例如, 超导体中的 Josephson 隧穿、液氮中的超流动性, 以及 Bose-Einstein 凝聚等都是众所周知的宏观量子效应例子。随着半导体微电子技术和测量技术的发展, 磁性材料的制备和研究已进入纳米尺度。低温下纳米磁体已表现出明显的量子特性, 纳米磁体磁化矢量的隧穿就是一种宏观量子现象, 它的研究可直接影响磁存储技术和量子计算。

Aharonov-Bohm 效应被认为是量子力学特有的现象, 通常只在量子力学框架内讨论和介绍。本书则从经典力学正则方程出发揭示出量子与经典之间的一一对应, 指出存在动力学和拓扑两类效应。Aharonov-Bohm 效应、Dirac 磁单极和超导体 Josephson 效应看起来互不相关, 其实它们有共同的物理本质, 即拓扑量子相位。本书把三者放在同一章中, 作为拓扑相因子的应用实例来讨论, 从而揭示出它们之间的内在联系。自旋和自旋-轨道耦合的动力学研究不仅有助于正确理解中子干涉实验和 Aharonov-Casher 效应, 而且还提供了一个非 Abel 规范场量子力学模型。此外, 书中还给出了半导体中自旋-轨道耦合的基本公式, 是理解介观系统自旋极化输运模型的有用知识。

量子隧穿周期瞬子方法在凝聚态、高能物理和量子引力中有广泛的应用, 本书在路径积分的基础上详细介绍了这一方法及其在分子磁体宏观量子效应研究中的应用。孤子 (瞬子) 解的小振动模是为了研究经典解的稳定性和路径积分的微扰计算而引入的, 把它们纳入超对称量子力学框架, 使其形成一个精确可解势模型家族, 从而提供了一个构造一维 Schrödinger 方程新解的系统方法。

量子计算是最近十多年来物理学和信息科学共同关注的热点研究领域,其主要动力来自于著名的 Shor 大数因子分解算法的提出。虽然国内从事量子信息科学研究的学者很多,但直接在量子算法的构造和理解等方面开展的工作却相对较少。通过本书第 7 章的实例,读者将能更具体地理解 Shor 量子算法的基本思想及其运行过程的概貌。另外,绝热逻辑门量子计算方案的提出为量子计算的物理实现提供了另一个可供选择的途径。

从量子力学诞生之日起,伴随着它的基本原理及解释的争论一直都没有中断过。量子力学作为一种成功的理论,已经被广泛地应用到了各个学科领域,也催生了各种新技术的发展和应用,然而其基本原理的实验检验仍是极具挑战性的研究课题。例如,关于量子理论本身的完备性以及非定域性关联问题,虽然已经在很多微观系统中(如光子、中子及囚禁离子等)得到了证实,但在宏观尺度上的实验例子还不多。鉴于超导电子学系统中宏观量子相干效应已经被实验证实,利用超导电路的量子调控来实现量子非局域关联的验证就有了现实意义。

值得指出的是,量子物理已成为近代科学的基础,其研究工作不仅有重要的基础理论意义,而且直接影响到相关新技术的发展。例如,物质波干涉和基于 Josephson 效应的宏观量子调控等都已发展成相应的技术。因此,本书的某些研究专题与当今及未来的量子技术发展有着密切联系。

本书的题材全选自作者自己做过的研究课题,并且对每个专题都进行了较深入的讨论,因此兼有研究专著的性质。全书的内容主要由七个相对独立但又彼此关联的专题组成,基本反映了作者多年来从事量子物理研究的历程和心得。每个专题都力求从原始模型的建立开始,自成体系,既方便读者选取自己感兴趣的题目阅读,也可单独用作研究生或本科生的教材。前五个专题主要论述量子态几何相因子和宏观量子效应,由梁九卿教授执笔;后两个专题涉及量子算法,宏观量子计算和量子力学基本原理的验证等,由韦联福教授撰写。

书中前 6 章的插图是由山西大学理论物理研究所的在读博士生常博和连进铃完成的,西南交通大学量子光电实验室的研究生们也为本书的部分文字录入工作提供了帮助,在此一并感谢。

作者还要特别感谢他们的合作者在各专题研究中所给予的帮助。

由于各个课题本身仍是不断发展的前沿问题,内容在不断更新和发展,书中难免有疏漏及不妥之处,恳请读者批评指正。

作 者

目 录

前言

第 1 章 规范变换, 正则量子化和经典量子对应	1
1.1 物质世界的经典图像及质点动力学	1
1.1.1 质点运动方程和最小作用量原理	1
1.1.2 规范变换	3
1.1.3 Hamilton 量和正则方程	4
1.1.4 物理量的时间演化 —— Poisson 括号	5
1.2 经典场, 电磁场动力学正则形式	5
1.2.1 Maxwell 方程	5
1.2.2 规范势场和规范变换	6
1.2.3 电磁场动力学正则形式	7
1.2.4 微分形式、Wedge 乘积和外微分	8
1.2.5 时空变换和相对论	9
1.3 多体系统 —— 物理观测量的统计规律	9
1.4 量子力学的逻辑体系	11
1.4.1 量子力学原理一 (态矢, 算符及其表示)	11
1.4.2 量子力学原理二 (动力学)	14
1.4.3 量子力学原理三 (测量假设)	15
1.4.4 量子力学原理的三个重要推论 (测不准关系, 非定域性, 宏观量子态的 相干叠加 —— Schrödinger 猫态)	15
1.4.5 态密度算符	17
1.4.6 量子力学中的规范变换	18
1.4.7 量子-经典对应和经典极限	19
参考文献	22
第 2 章 Aharonov-Bohm 效应、奇异规范变换和 Dirac 磁单极	23
2.1 电磁场中带电粒子的经典动力学	23
2.1.1 正则动量和力学动量	24
2.1.2 规范变换	24
2.2 带电粒子在局域磁通矢势场中的经典动力学	25
2.2.1 局域磁通的矢势和多连通空间 —— 拓扑流形	25

2.2.2	局域磁通引出的拓扑相互作用项: Wess-Zumino 项	26
2.2.3	Wess-Zumino 项的经典效应	27
2.3	拓扑相互作用项的量子力学效应: Aharonov-Bohm 效应	29
2.3.1	量子力学中的规范变换 —— $U(1)$ 规范变换	29
2.3.2	束缚态 AB 效应: 一个最简单的拓扑场论模型	30
2.3.3	Dirac 不可积相因子 —— AB 相位	31
2.3.4	AB 相位干涉: 拓扑效应	32
2.3.5	Josephson 效应 —— 标量势 AB 相位	33
2.3.6	超导量子干涉仪原理 —— AB 拓扑相位干涉	34
2.3.7	分数 (正则) 角动量和任意子	35
2.4	多连通空间量子力学, 纤维丛, AB 相位的几何意义	37
2.4.1	多连通空间的基本群, 纤维丛	37
2.4.2	拓扑相因子的几何意义	38
2.5	奇异规范变换和 Dirac 磁单极	38
2.5.1	Dirac 磁单极	38
2.5.2	吴-杨无奇异的磁单极理论	40
2.5.3	Dirac 量子化条件的几何意义	41
2.6	带电粒子被磁通线的散射	41
2.6.1	精确解和微分散射截面	42
2.6.2	分波相移和长程势的散射边条件	43
2.6.3	长程势的截断和返回磁通	44
2.7	介观环输运电流的相干振荡	44
2.7.1	一维量子波导理论	45
2.7.2	AB 介观环电荷输运传输矩阵	45
	参考文献	46
第 3 章	自旋-轨道耦合动力学, Aharonov-Casher 相位和非 Abel 规范场量子力学模型	49
3.1	中性自旋粒子在电磁场中的经典动力学	49
3.1.1	拉氏量和运动方程	49
3.1.2	正则动量和 Hamilton 量	51
3.2	非 Abel 规范场	52
3.3	脉冲磁场中的热中子经典动力学和标量势 AB 效应	53
3.3.1	经典动力学方程和 Larmor 进动	54
3.3.2	标量势 AB 效应	55
3.3.3	自旋相干态, 热中子干涉的动力学解释	56

3.3.4 经典-量子对应, 量子 Larmor 进动	57
3.4 轴对称静电场中的中子动力学和 AC 效应	58
3.4.1 经典动力学	58
3.4.2 非 Abel 规范场和微分联络	60
3.4.3 非 Abel 几何相位和分数自旋	60
3.4.4 AC 效应和中子干涉实验	62
3.5 原子中的自旋-轨道耦合	64
3.6 半导体中的自旋-轨道耦合	64
3.6.1 Rashba 耦合	65
3.6.2 Dresselhaus 耦合	65
3.7 附录: 自旋运动方程的推导	65
参考文献	66
第 4 章 量子态的时间演化和几何相位	69
4.1 引言	69
4.2 非简并瞬时本征态和绝热 Berry 相位	69
4.3 周期演化和 AA 相位	71
4.4 含时规范变换和规范固定	72
4.5 坐标和动量空间的几何相	73
4.5.1 带电粒子环绕磁通运动的几何相位 —— AB 相位	73
4.5.2 $U(1)$ 厄米丛, 平行移动和反常和乐	73
4.5.3 动量空间, 能带中 Bloch 电子动力学和整数量子 Hall 效应	74
4.6 不变量和规范不变的相位	75
4.7 含时系统精确解的规范变换方法	76
4.7.1 特解和几何相位	77
4.7.2 通解和时间演化么正算符	78
4.7.3 $SU(2)$ 和 $SU(1, 1)$ 含时系统精确解和几何相位	78
4.8 量子化光场中二能级原子的几何相位 —— 含时规范变换的应用	80
4.8.1 含时规范变换和规范选取的意义	81
4.8.2 J-C 模型的 Berry 相	82
4.9 简并态几何相位和非 Abel 规范场	83
4.9.1 简并态几何相	83
4.9.2 自旋相干态和非 Abel 规范场的分子磁体实现	83
4.10 附录: 量子化光场中的二能级原子 Hamilton 算符	85
参考文献	88
第 5 章 路径积分, 量子隧穿的瞬子方法和宏观量子效应	90
5.1 量子力学的路径积分	90

5.1.1	传播子的定义和基本特性	90
5.1.2	传播子计算	92
5.1.3	定态相位微扰	95
5.2	多连通空间, 自旋的路径积分理论	96
5.2.1	二维多连通空间的路径积分和拓扑相位	96
5.2.2	自由平面转子	98
5.2.3	旋转坐标系中的平面转子 —— 非平庸拓扑相位的简单模型, 分数角动量	100
5.2.4	AB 规范场中的平面转子	101
5.3	配分函数的路径积分表示	104
5.4	量子隧穿的瞬子理论	104
5.4.1	简并基态间的往复共振隧穿 —— 瞬子, 拓扑荷	104
5.4.2	双势阱基态共振隧穿几率的计算	109
5.4.3	亚稳基态的量子隧穿衰变 —— bounce(非拓扑解)	110
5.5	周期瞬子和激发态量子隧穿	113
5.5.1	周期瞬子及其稳定性	113
5.5.2	负模困难及消除	114
5.5.3	激发态共振隧穿率的计算	115
5.5.4	高低能极限	118
5.6	周期 bounce 和激发态量子隧穿衰变	120
5.6.1	微扰算符的本征态和本征值, 多重负模	121
5.6.2	激发态量子隧穿衰变率的计算	122
5.6.3	高低能极限	123
5.7	量子隧穿几率幅计算的 LSZ 方法	124
5.8	量子隧穿的有限温度理论	127
5.8.1	从量子隧穿到经典热跃迁的过渡 —— 相变过程	128
5.8.2	瞬子周期和温度的关系	128
5.9	分子磁体宏观量子效应	129
5.9.1	宏观量子隧穿	130
5.9.2	宏观量子态和宏观量子相干 —— Schrödinger 猫态的分子磁体实现	130
5.9.3	隧穿率的计算 —— 瞬子方法	131
5.9.4	量子 —— 经典过渡, 一级相变	139
	参考文献	141
第 6 章	超对称量子力学, 孤子 (瞬子) 稳定性和涨落方程	146
6.1	超对称量子力学模型	146

6.2	超对称破缺	148
6.3	围绕经典解的涨落方程和超对称	150
6.3.1	1+1 维经典场孤子 (瞬子) 解稳定性和量子涨落方程	150
6.3.2	孤子 (瞬子) 稳定性的物理解释和判据	151
6.3.3	零模和超对称	152
6.3.4	周期解涨落方程的超对称势	155
	参考文献	158
第 7 章	量子算法的少比特数模拟及量子计算的绝热操纵实现方案	159
7.1	量子计算概述	159
7.1.1	经典计算的原理性限制	159
7.1.2	量子计算的并行性	160
7.1.3	量子计算的主要步骤	161
7.2	Shor 量子算法及其少比特数情况下的模拟	162
7.2.1	Shor 量子算法的基本思想	162
7.2.2	Shor 量子算法的少比特数模拟: 相干错误的纠正	163
7.3	量子计算的各种可能实现方案	168
7.3.1	逻辑门量子计算	168
7.3.2	绝热量子计算	170
7.3.3	小结	171
7.4	绝热逻辑门量子计算	171
7.4.1	单比特逻辑门操作的实现	172
7.4.2	两比特量子逻辑门操作的绝热操纵实现	174
7.4.3	在超导位相比特系统中实现绝热逻辑门量子计算	175
	参考文献	179
第 8 章	利用宏观量子相干效应验证量子力学中的非定域性关联	180
8.1	宏观尺度上的量子相干效应	180
8.2	在超导电路中通过验证 Bell 不等式来验证量子力学中的非局域关联	183
8.2.1	Bell 不等式	183
8.2.2	利用近似单比特操作进行近似局域变量编码的 Bell 不等式验证	185
8.2.3	利用有效单比特操作进行有效局域变量编码的 Bell 不等式验证	189
8.3	在三比特超导电路中确定性地验证 Bell 定理	193
8.3.1	超导电路中的宏观 GHZ 态制备及证实	193
8.3.2	Bell 定理的确定性验证	197
	参考文献	199

第 1 章 规范变换, 正则量子化和经典量子对应

本章是基础知识的简要回顾和总结, 旨在用最简单的系统 (一个自由度的点粒子和真空中的自由电磁场) 为例来阐述经典动力学和量子力学的正则化公理体系和一些重要的基本概念, 如规范变换、经典-量子对应等。文献中经典-量子对应大多只讨论在大量子数极限下 (或者 $\hbar \rightarrow 0$) 量子力学趋于经典理论。其实, 在相干态 (包括自旋相干态) 中, 力学量期待值的时间演化和经典动力学方程完全一致, 这种意义下的经典-量子对应宏观量子效应中起更为重要的作用。Aharonov-Bohm 和 Berry 相位、磁单极和任意子的讨论必然涉及拓扑流形和微分几何, 为方便读者阅读, 我们以 $U(1)$ 规范场为例给出了微分形式和外微分的基本公式。

1.1 物质世界的经典图像及质点动力学

物理学研究物质世界的演变规律及其所以如此演化的道理。有物质有道理, 即所谓物理。物理学试图穷究一切事物的道理, 没有固定的研究对象, 物质系统有广泛的含义, 例如, 它也可以是社会系统。物理学研究的系统都有可供实验测量的量, 称为物理观察量, 它们一般是空间坐标和时间的函数, 泛称为场变量。在这种广义的场变量概念下一切物理量都可称为场变量。例如, 点粒子的坐标 $\mathbf{r}(t)$ 只是时间的函数, 空间缩为一几何点, 是零维的, 称为 $0+1$ 维矢量场; 电场强度 $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ 是 $3+1$ 维矢量场。描述各种系统的不同物理量, 也可能是旋量、张量场等。运动定律描述物理观察量之间关系和演化的规律性, 并用数学公式表示, 是系统的本质属性, 原则上它应当被实验检测, 而且, 实验可无限重复。当然, 运动定律常常是理想条件下的规律, 它们的建立包含了合理的简化和逻辑推理。物理学的任务不仅是发现并总结出系统的运动和变化规律, 而且要抽象上升到和具体系统无关的原理, 原理具有普适性, 即所谓的道理。例如, 点粒子运动遵从 Newton 定律, 而电磁场满足 Maxwell 方程等, 它们都是运动规律, 都可统一到 Hamilton 原理, 或者最小作用量原理中。物理其实是以数学为手段, 研究任何未知事物存在和演化道理的方法, 物理学的方法可用到有固定研究对象的学科中, 如化学物理、生物物理等。

1.1.1 质点运动方程和最小作用量原理

我们用一个最简单的系统, 即单个粒子在一维空间中的运动为例, 来解释其运动规律并揭示产生这种规律的道理。这一简单系统的物理观察量是 $q(t)$ ($0+1$

维实标量场), 如它可以是粒子空间运动的坐标 —— 广义坐标, 相应的广义速度是 $\dot{q}(t) = \frac{dq}{dt}$ 。质点运动规律由 Newton 方程描述, 它是实验观测的总结, 人们可以认识和发现规律但不能创造规律。我们假定粒子在一保守力场中运动, 即存在一个相应的不显含时间的势函数 $V(q)$, 则物理观测量 $q(t)$ 时间演化遵从的运动方程是

$$m\ddot{q} = -\frac{\partial V(q)}{\partial q} \quad (1.1.1)$$

由于势函数不显含时间, 运动方程满足时间平移不变, 积分一次后变为

$$\frac{1}{2}m\frac{d}{dt}(\dot{q})^2 = -\frac{dV}{dt} \quad (1.1.2)$$

由此得到一个守恒量 —— 机械能, 记为 E , 积分一次后的运动方程则是

$$E = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + V \quad (1.1.3)$$

守恒量总是对应于运动规律的某种时空变化对称性, 特别是当 $V(q) = 0$ 时, 方程 (1.1.1) 还具有空间平移不变性, 由此又导致动量守恒

$$m\dot{q} = p$$

动量 p 是常数。物理学并不满足于仅给出系统的运动方程, 这里一个要回答的问题是, 得出 Newton 方程的道理或者原理是什么? 这一原理应具有普遍性, 不依赖系统的具体特性。我们用上述的简单系统给出力学原理的引导, 为此, 定义一个 Lagrange 函数 (以下简称拉氏量)

$$L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - V(q) \quad (1.1.4)$$

它是组态空间的函数, 对这一简单系统来说, 就是动能减势能。再定义一称为作用量的泛函

$$S = \int_{q(t_i)}^{q(t_f)} L(q, \dot{q}) dt \quad (1.1.5)$$

作用量依赖于拉氏量。对于固定的空间两点 $q(t_i)$ 和 $q(t_f)$, 经典粒子总是走使作用量最小的路径, 称为最小作用量原理或者 Hamilton 原理。对 S 变分取极值, 可得

$$\delta S = \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right) dt = \int_{t_i}^{t_f} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q dt = 0 \quad (1.1.6)$$

第二等式中用了分部积分, 并注意到固定端点的变分为零。由于 δq 是任意路径变分 (图 1.1.1), 所以

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0 \quad (1.1.7)$$

即 Lagrange 方程 (以下简称拉氏方程)。

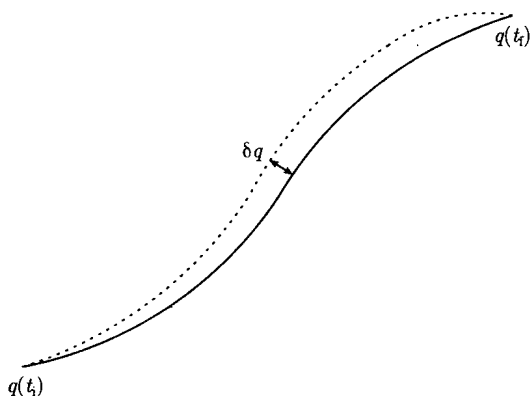


图 1.1.1 固定端点的路径变分

例如，一维谐振子的拉氏量是

$$L = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \quad (1.1.8)$$

代入上面的拉氏方程，就得到熟悉的谐振子运动方程

$$\ddot{q} + \omega^2 q = 0 \quad (1.1.9)$$

我们用点粒子解释了力学原理的引导，其实，该原理具有普适意义，从最小作用量原理出发，各种物理系统的时间演化规律都可以从同一原理演绎得到。例如，电磁场的场变量运动规律由 Maxwell 方程描述，它遵从同样的最小作用量原理。

1.1.2 规范变换

规范变换 (gauge transformation) 是描述基本粒子间相互作用的规范场理论中的一个重要概念，它其实有更广泛的意义。对于给定系统的运动方程 (实验规律)，拉氏函数 L 并不是唯一的，我们可以加任意一个时空函数 $f(q, t)$ 的全导数。新的拉氏函数为

$$L' = L + \frac{df(q, t)}{dt} = L + \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{q} \frac{\partial f}{\partial q} \quad (1.1.10)$$

从它导出的拉氏方程为

$$\frac{\partial L'}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L'}{\partial \dot{q}} \right) = \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = 0 \quad (1.1.11)$$

与原来的拉氏函数 L 给出的拉氏方程完全相同。这一事实很容易验证，因为

$$\frac{\partial L'}{\partial q} = \frac{\partial L}{\partial q} + \frac{\partial^2 f}{\partial t \partial q} + \dot{q} \frac{\partial^2 f}{\partial q^2} \quad (1.1.12)$$

和

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L'}{\partial \dot{q}} \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial f}{\partial \dot{q}} \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) + \frac{\partial^2 f}{\partial q \partial t} + \dot{q} \frac{\partial^2 f}{\partial q^2} \quad (1.1.13)$$

我们称这种变换为规范变换, 或者广义规范变换。电磁场 ($U(1)$ 规范场) 理论中的规范变换是大家熟知的, 下面 2.1.2 节中我们会看到它实际上只是现在这种普遍表述的一个具体形式。

1.1.3 Hamilton 量和正则方程

拉氏方程中时间导数是二阶的, 我们可以把方程降为一阶, 代价是独立变量加倍。定义正则动量 (canonical momentum)

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \quad (1.1.14)$$

坐标和动量为独立变量的空间称为相空间, 系统的 Hamilton 量 (Hamiltonian) 定义为

$$H(q, p) = p\dot{q} - L \quad (1.1.15)$$

它是相空间 (q, p) 的函数。我们可定义相空间拉氏量

$$L(q, p) = p\dot{q} - H(q, p) \quad (1.1.16)$$

再对作用量

$$S = \int [q\dot{p} - H(q, p)] dt$$

变分取极值 (最小作用量原理)

$$\begin{aligned} \delta S &= \int \left[\dot{p}\delta q + q\delta\dot{p} - \frac{\partial H}{\partial q}\delta q - \frac{\partial H}{\partial p}\delta p \right] dt \\ &= \int \left[\dot{p}\delta q - \dot{q}\delta p - \frac{\partial H}{\partial q}\delta q - \frac{\partial H}{\partial p}\delta p \right] dt = 0 \end{aligned} \quad (1.1.17)$$

独立变量变分 $\delta q, \delta p$ 前系数为零, 我们就能得到下面的正则方程 (canonical equation), 也称 Hamilton 方程:

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (1.1.18)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (1.1.19)$$

增加了独立变量, 不仅使方程变为对称的一阶方程组, 而且正则动量的引入有更重要的意义。和拉氏方程不同, 正则方程中的 Hamilton 量只有势函数, 和量子力学的 Schrödinger 方程一致。当有规范场存在时正则动量不等于力学动量, 特别是在场为零而势不为零的空间可导致拓扑量子效应 (topological quantum effect), 即

Aharonov-Bohm(AB) 效应。从正则方程的观点, AB 效应有明显的量子-经典对应(见本书第 2 章), 只不过是量子力学中波函数的相位干涉使这一拓扑效应可被实验观测到而已。

作业 1.1 证明 Hamilton 方程在规范变换下不变。提示: 正则动量和 Hamilton 量的规范变换分别表示为

$$p' = \frac{\partial L'}{\partial \dot{q}}$$

$$H' = p' \dot{q} - L'$$

1.1.4 物理量的时间演化——Poisson 括号

相空间任意力学量 $A(q, p)$ 的时间演化可表示为

$$\frac{dA(q, p)}{dt} = \dot{q} \frac{\partial A}{\partial q} + \dot{p} \frac{\partial A}{\partial p} = \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} = \{A, H\} \quad (1.1.20)$$

最后一个等式中我们引入了一个重要的记号——Poisson 括号。若 $A(q, p)$, $B(q, p)$ 是两个力学量, 其 Poisson 括号的一般定义为

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q} \quad (1.1.21)$$

显然

$$\{q, p\} = 1$$

作业 1.2 证明角动量 Poisson 括号, 即角动量

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

各分量满足关系

$$\{L_i, L_j\} = \sum_k \epsilon_{ijk} L_k \quad (1.1.22)$$

其中, ϵ_{ijk} 是通常的反对称张量, $i = x, y, z$ 。

1.2 经典场, 电磁场动力学正则形式

1.2.1 Maxwell 方程

真空中电磁场物理观测量是实矢量场 $\mathbf{E}$ 和 $\mathbf{B}$, 其微分形式的运动方程为

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho \quad (1.2.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} - \frac{\partial \mathbf{E}}{c \partial t} = \frac{4\pi \mathbf{j}}{c} \quad (1.2.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.2.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{c \partial t} \quad (1.2.4)$$

称为 Maxwell 方程, 这里我们使用了 Gauss 单位制。

1.2.2 规范势场和规范变换

由 Maxwell 方程 (1.2.3) 和方程 (1.2.4) 可引入矢量势 $\mathbf{A}$ 和标量势 V , 称其为规范势

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (1.2.5)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla V - \frac{\partial \mathbf{A}}{c \partial t} \quad (1.2.6)$$

当然规范势 $\mathbf{A}$ 和 V 不是唯一的, 我们可用规范变换引入新的规范势

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f \quad (1.2.7)$$

$$V' = V - \frac{\partial f}{c \partial t} \quad (1.2.8)$$

f 是一任意时空标量函数, 显然电场强度和磁感应强度在规范变换下不变。我们总可以选适当规范使规范势满足 Lorentz 条件

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{\partial V}{c \partial t} = 0 \quad (1.2.9)$$

则场运动方程变为简单的形式

$$\frac{\partial^2 \mathbf{A}}{c^2 \partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{A} = \frac{4\pi \mathbf{j}}{c} \quad (1.2.10)$$

$$\frac{\partial^2 V}{c^2 \partial t^2} - \nabla^2 V = 4\pi \rho \quad (1.2.11)$$

引入四维协变坐标

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4 = ict)$$

四维规范场矢量

$$\mathbf{A} = (A_1, A_2, A_3, A_4 = iV)$$

和四维流矢量

$$\mathbf{j} = (j_1, j_2, j_3, j_4 = ic\rho)$$

运动方程 (1.2.9)~ 方程 (1.2.11) 则变为

$$\square A_\mu = -\frac{4\pi j_\mu}{c}, \quad \mu = 1, 2, 3, 4 \quad (1.2.12)$$

$$\sum_{\mu=1}^4 \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\mu} = 0 \quad (1.2.13)$$

其中

$$\square = \sum_{\nu=1}^4 \frac{\partial^2}{\partial x_\nu^2}$$

是 d'Alembert 算符, 方程 (1.2.13) 称为 Lorentz 条件或者 Lorentz 规范。电磁场 (1.2.5) 和 (1.2.6) 的协变形式可统一成为一反对称张量

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} \quad (1.2.14)$$

其明显的矩阵形式是

$$F = \begin{pmatrix} 0 & B_3 & -B_2 & -iE_1 \\ -B_3 & 0 & B_1 & -iE_2 \\ B_2 & -B_1 & 0 & -iE_3 \\ iE_1 & iE_2 & iE_3 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.2.15)$$

1.2.3 电磁场动力学正则形式

为简单起见, 考虑自由场方程, 即电荷、电流及标势皆为零, 场方程简化为

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{c^2 \partial t^2} = 0 \quad (1.2.16)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (1.2.17)$$

第二个方程即通常所说的横波条件, 也称 Coulomb 规范, 由 Lorentz 条件退化而来。可把两方程合并成一个方程

$$\sum_{j \neq i} \left(\frac{\partial^2 A_i}{\partial x_j^2} - \frac{\partial^2 A_j}{\partial x_i \partial x_j} \right) - \frac{\partial^2 A_i}{c^2 \partial t^2} = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (1.2.18)$$

相应的拉氏密度可构造为

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \left[\left(\frac{\partial A_i}{c \partial t} \right)^2 - \left(\sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{i,j,k} \frac{\partial A_k}{\partial x_j} \right)^2 \right] \quad (1.2.19)$$

把该拉氏密度代入场变量是 A_i 的作用量

$$S = \int \mathcal{L} d\mathbf{x} dt$$

由最小作用量原理

$$\delta S = 0$$

可得到如下的拉氏方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial A_i / \partial t)} + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial A_i / \partial x_j)} = 0 \quad i = 1, 2, 3 \quad (1.2.20)$$

此即上面的自由电磁场方程 (1.2.18)。场的正则动量密度根据定义是

$$\pi_{A_i} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial A_i / \partial t)} = \frac{\partial A_i}{c^2 \partial t} \quad (1.2.21)$$

Hamilton 密度则是熟悉的形式

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial A_i}{\partial t} \pi_{A_i} - \mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \left[c^2 \pi_{A_i}^2 + \left(\sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{i,j,k} \frac{\partial A_j}{\partial x_k} \right)^2 \right] = \frac{1}{2} (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) \quad (1.2.22)$$

1.2.4 微分形式、Wedge 乘积和外微分

本书中讨论的 Aharonov-Bohm 效应、任意子和 Dirac 磁单极等必然涉及拓扑流形及微分形式的概念和运算, 虽然并不要求读者具备微分几何知识, 但有关微分形式和外微分的定义及简单公式对阅读本书的相关内容是很有用的。我们已经把电磁场写成四维协变形式, 以此为例给出本书中用到的微分形式和外微分的简单公式。

1. 微分一次式

四维势场是个矢量, 记为

$$\mathbf{A} = (A_1, A_2, A_3, A_4)$$

四维分基矢则分别是

$$dx = (dx_1, dx_2, dx_3, dx_4)$$

和

$$\frac{\partial}{\partial x} = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3}, \frac{\partial}{\partial x_4} \right)$$

联络微分一次式 (connection one-form) 是一标量, 定义为

$$\omega = A dx = \sum_{\mu=1}^4 A_{\mu} dx_{\mu} \quad (1.2.23)$$

本书中我们不引入场论中的协变和抗变指标, 以及求和惯例。微分算符

$$d = dx \frac{\partial}{\partial x} = \sum_{\mu} dx_{\mu} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} \quad (1.2.24)$$

是一标量, 而一个标量函数 f 的微分一次式显然是

$$df = \sum_{\mu} \frac{\partial f}{\partial x_{\mu}} dx_{\mu} \quad (1.2.25)$$