

# 量子体系缓变过程的准绝热近似和 Berry 相因子

孙昌璞

(东北师范大学, 长春)

## 摘 要

本文首先基于群论的方法, 通过分析量子体系哈密顿的对称性, 给出一种求解波动方程的近似方法——准绝热近似, 以用来解决体系的哈密顿量作缓慢有限改变的量子跃迁问题. 作为零级近似, 严格地证明了具有简并情况的量子绝热定理, 它的推论给出具有明显拓扑性质的 Berry 相因子. 我们还给出了绝热条件破坏的几何解释, 并说明了 Berry 相因子普遍存在于以哈密顿量确定的变化所需时间  $T$  所标度的量子过程中. 最后我们指出了对应于绝热条件破坏的缓变过程的可观察效应.

## 一、引 言

Berry 相因子<sup>[1]</sup>是量子力学中不多见的、具有明显不可积拓扑性质的物理量. 它不仅可以用来解释已被证实的 Aharonov-Bohm 效应<sup>[2]</sup>和 Aharonov-Susskinol 效应<sup>[3]</sup>, 而且在新的实验中得到证实.

最近, G. DeLacretaz 验证了  $\text{Na}_3$  分子体系中 Berry 相因子的存在<sup>[4]</sup>. A. Tomito 和 R. Y. Chiao 又成功地实现了 Chiao 本人和吴咏时提出的观察玻色子 Berry 相因子的光纤实验<sup>[5]</sup>.

在理论方面, P. Nelson, L. Alvarez-Gaume 和 H. Sonoda 已指出了规范场手征反常和 Berry 相因子有着密切联系<sup>[6]</sup>. G. W. Semenoff 和 P. Sodno 还用这个概念讨论了量子 Hall 效应<sup>[7]</sup>, 另外, Berry 本人和其他几位作者还讨论了 Berry 相因子的半经典对应<sup>[8]</sup>. 可见, Berry 相因子及其相关的问题已引起人们的重视.

M. V. Berry 在研究量子体系的准静态过程——绝热过程时提出了 Berry 相因子这一重要概念. 考虑一个量子体系, 它的哈密顿量

$$\hat{H} = \hat{H}[R_1(t), R_2(t), \dots, R_N(t)] \equiv \hat{H}[R(t)] \quad (1)$$

是通过一组参数  $R(t): \{R_1(t), R_2(t), \dots, R_N(t)\}$  依赖于时间  $t$ . 参数的全体构成了所谓的参数流形  $M$ . 量子绝热定理认为<sup>[9]</sup>, 当  $\hat{H}$  由  $t_0$  时刻的初值  $\hat{H}[R(t_0)]$  变化到  $t_1$  时的

终值  $\hat{H}[R(t_1)]$  的时间  $T = t_1 - t_0 \rightarrow \infty$ , 即  $\hat{H}$  作无穷缓慢改变时, 若  $t_0$  时刻体系处于  $\hat{H}[R(t_0)]$  的本征态  $\phi_n[R(t_0)]$  上, 则在  $t_1$  时刻将在  $\hat{H}[R(t_1)]$  的本征态  $\phi_n[R(t_1)]$  上. 作为定理的推论<sup>[9]</sup>, 含时 Schrödinger 方程的解应是

$$\Psi(x, t) = \exp \left[ \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \epsilon_n[R(t')] dt' \right] \cdot \phi_n[R(t)] \quad (2)$$

其中  $\epsilon_n[R(t)]$  是对应于  $\hat{H}[R(t)]$  本征函数  $\phi_n[R(t)]$  的本征值.

1984 年, 英国 Bristol 大学的 M. V. Berry 指出了推论(2)的错误, 认为正确的结果应在  $\Psi(x, t)$  的动力学相因子  $\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \epsilon_n[R(t')] dt'$  上附加一个几何相因子

$$\nu_n(t) = \int_{t_0}^t \left\langle \phi_n[R(t)] \left| \frac{\partial}{\partial t} \phi_n[R(t)] \right. \right\rangle dt.$$

当  $\hat{H}$  沿参数流形  $M$  中的闭合曲线变化时, 给出所谓的 Berry 相因子  $\nu_n(c)$ . B. Simon 指出了  $\nu_n(c)$  的几何解释, 认为  $\nu_n(c)$  是以  $M: \{R\}$  为底流形的纤维丛 (局部同构于  $M \times \mathcal{H}$ .  $\mathcal{H}$  是希尔伯特空间) 中厄米线丛  $\{(R, \phi) | \hat{H}(R)\phi = \epsilon(R)\phi\}$  上的和乐 (holonomy). 于是, Berry 相因子开始引起人们的注意.

然而, 一方面我们考虑到 Berry 是在旧绝热定理 (具有错误推论) 成立条件下进行讨论, 数学上是不严格的, 我们有必要重新考察绝热定理的证明; 另一方面, 也是本文的主旨, 我们要研究绝热定理条件破坏时 (对应于  $\hat{H}$  有限缓慢改变的过程) Berry 相因子的存在性问题. 为此我们提出一种以绝热近似为零级近似的准绝热近似方法.

## 二、对称性分析

设在 Schrödinger 表象中体系的哈密顿量  $\hat{H}[R(t)]$  具有不随时间改变的群  $G$  对称性, 体系状态不会因为参数  $R$  的变化出现偶然简并.

对应于  $\hat{H}[R(t)]$  的本征值  $\epsilon_n^{[p]}[R(t)]$  的一组本征函数  $\phi_{n\alpha}^{[p]}[R(t)] (\alpha = 1, 2, \dots, d_p)$  构成了  $\hat{H}$  的对称性群  $G$  的不可约酉表示的标准基. 由群表示的正交定理知

$$\langle \phi_{m\alpha}^{[p]}[R(t)] | \phi_{n\beta}^{[q]}[R(t')] \rangle = \delta_{pq} \delta_{\alpha\beta} \cdot \langle \phi_{m\alpha}^{[p]}[R(t)] | \phi_{n\alpha}^{[p]}[R(t')] \rangle \quad (3)$$

其中双重指标  $m, \alpha$  表示不同的能级  $\epsilon_n^{[p]}[R(t)]$  可能对应于同一个不可约表示. 通常  $P$  受  $m$  限制, 给定  $m, P$  取值全体记为  $C(m)$ .

为了描述量子体系随时间的演化, 引入过程投影算子

$$\begin{aligned} P_{n\alpha\beta}^{m\alpha}[t_0, t] &= |\phi_{n\beta}^{[q]}[R(t)]\rangle \langle \phi_{m\alpha}^{[p]}[R(t_0)]| \\ P_{m\rho\alpha}[t_0, t] &= P_{m\rho\alpha}^{m\rho\alpha}[t_0, t], \quad P_{m\rho\alpha}[t] = P_{m\rho\alpha}[t, t]; \end{aligned} \quad (4)$$

其中  $P_{m\rho\alpha}[t]$  是对应于态  $\phi_{m\alpha}^{[p]}[R(t)]$  的普通投影算子.

设 Schrödinger 方程  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H[R(t)]\psi(t)$  的形式解是:

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

由此定义的演化算子  $U(t_0, t)$  满足

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t_0, t) = H[R(t)]U(t_0, t), \quad U(t_0, t_0) = 1 \quad (5)$$

$U(t_0, t)$  具有双重作用: 由  $U(t_0, t)$  既可以给出描述量子体系演化的 Heisenberg 表象, 又能从初始状态  $\phi(0)$  得到 Schrödinger 表象中的波函数  $\phi(t)$ . 由 (4),  $U(t_0, t)$  表达为

$$U(t_0, t) = \sum_{m p \alpha} \sum_{n q \beta} \exp \left\{ \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \varepsilon_m^{[p]} [R(t')] dt' \right\} C_{n q \beta}^{m p \alpha} [t] \cdot P_{m p \alpha}^{n q \beta} [t_0, t] \quad (6)$$

$$\text{其中 } \sum_{m p \alpha} = \sum_m \sum_{p \in C(m)} \sum_{\alpha=1}^{d_p}$$

把(6)代入(5)并利用投影算子的性质

$$\hat{H}[R(t)] P_{m p \alpha}^{n q \beta} [t_0, t] = \varepsilon_{m p} [R(t)] P_{m p \alpha}^{n q \beta} [t_0, t] \quad (7)$$

可得到系数  $C_{n q \beta}^{m p \alpha} [t]$  满足的微分方程组:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} C_{n q \beta}^{m p \alpha} [t] &= \sum_{n q \beta} \langle \phi_{m \alpha}^{[p]} [R(t)] | \nabla_R \phi_{n \beta}^{[q]} [R(t)] \rangle \cdot \frac{dR}{dt} \\ &\times \exp \left\{ \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t [\varepsilon_m^{[p]} [R(t')] - \varepsilon_n^{[q]} [R(t')]] dt' \right\} \cdot C_{n q \beta}^{m p \alpha} (t) \quad (8) \end{aligned}$$

$$C_{n q \beta}^{m p \alpha} [0] = \delta_{m l} \delta_{p s} \delta_{\alpha r}$$

其中  $\nabla_R = \left( \frac{\partial}{\partial R_1}, \frac{\partial}{\partial R_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial R_N} \right)$  是参数流形  $M: \{R\}$  上的 1-矢量,  $dR = (dR_1, dR_2, \dots, dR_N)$  是  $M$  上的 1-形式.

利用表征  $\hat{H}$  对称性的正交关系(3), 以式

$$M_{m p \alpha}^{n q \beta} (t) = \langle \phi_{m \alpha}^{[p]} [R(t)] | \nabla_R \phi_{n \beta}^{[q]} [R(t)] \rangle \quad (9)$$

定义的矩阵  $M$  化为准对角形. 事实上, 由于参数  $R$  的连续改变不会使不可约表示  $\Gamma^{[p]}$  跃变为另一个不可约表示  $\Gamma^{[p']}$ , 则由(3)可得

$$\begin{aligned} M_{m p \alpha}^{n q \beta} (t) &= \lim_{\Delta R \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta R} [\langle \phi_{m \alpha}^{[p]} [R] | \phi_{n \beta}^{[q]} [R + \Delta R] \rangle \\ &- \langle \phi_{m \alpha}^{[p]} [R] | \phi_{n \beta}^{[q]} [R] \rangle] = \delta_{p q} \delta_{\alpha \beta} M_{m p 1}^{n q 1}. \quad (10) \end{aligned}$$

于是, 方程可简化为:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} C_{n q \beta}^{m p \alpha} [t] &= - \sum_n \langle \phi_{m \alpha}^{[p]} [R(t)] | \nabla_R \phi_{n \alpha}^{[p]} [R(t)] \rangle \cdot \frac{dR}{dt} \\ &\times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t [\varepsilon_m^{[p]} [R(t')] - \varepsilon_n^{[p]} [R(t')]] dt' \right\} C_{n q \beta}^{m p \alpha} (t). \quad (11) \end{aligned}$$

可见通过群论对称性分析的方法, 可以使我们讨论的问题大大简化.

### 三、关于演化矩阵的积分方程

根据上述讨论, 记:  $C_{l s r}^{m p \alpha} (t) = C_l^m (t)$ ,  $\varepsilon_m^p [R(t)] = \varepsilon_m (t)$  并不引起混乱. 对于固定的  $\hat{H}[R(t_0)]$  和  $\hat{H}[R(t_1)]$  ( $t_1 - t_0 = T$ ), 我们讨论  $\dot{R}(t)$  的大小——哈密顿量变化的快慢对方程(11)解的行为的影响. 为此引入相对时间  $\tau = t/T$  ( $0 \leq \tau \leq 1$ ), 并设

$$C_l^m (t) = C_l^m (T \cdot \tau) = b_l^m (\tau), \quad R^\alpha (t) = R^\alpha (T \cdot \tau) = S^\alpha (\tau)$$

则方程组(11)可重新写为

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} b_i^m(\tau) &= - \sum_n S_{mn} b_i^n(\tau) \\ b_i^m(0) &= \delta_i^m, \end{aligned} \quad (12)$$

其中矩阵  $\tilde{S}(\tau)$  的矩阵元  $S_{mn}(\tau)$  定义为

$$\begin{aligned} S_{mn}(\tau) &= \beta_{mn}(\tau) e^{iT\alpha_{mn}(\tau)} \\ \alpha_{mn}(\tau) &= \exp \frac{1}{\hbar} \int_{\tau_0}^{\tau} \left[ \varepsilon_m[S(\tau')] - \varepsilon_n[S(\tau')] \right] d\tau' \end{aligned} \quad (13)$$

$$\beta_{mn}(\tau) = \langle \phi_m[S(\tau)] | \nabla_S \phi_n[S(\tau)] \rangle \cdot dS/d\tau$$

关于演化矩阵  $U(t_0, t)$  展开系数积分方程可由(12)式给出.

$$b_i^m(\tau) = \delta_i^m - \sum_n \int_{\tau_0}^{\tau} S_{mn}(\tau') b_i^n(\tau') d\tau' \quad (14)$$

这是一个 Volterra 型积分方程组. 致此, 我们把计算演化矩阵  $U(t_0, t)$  转化为计算无穷维矩阵  $\tilde{b}(\tau) = (b_i^m(\tau))$ . (14)式可表为矩阵形式

$$\tilde{b}(\tau) = E - \int_{\tau_0}^{\tau} \tilde{S}(\tau) \tilde{b}(\tau) d\tau \quad (14')$$

方程(14)和(14')将作为我们讨论问题的出发点.

由于对于实际问题精确求解(12)或(14)是相当困难的, 我们首先考察在以  $T$  为标度的缓变过程中, (14)或(14')的渐近行为, 给出所谓的准绝热近似解法.

#### 四、准绝热近似方法

在以下讨论中不失一般性取  $t_0 = 0$ .

定义矩阵  $F^i(T, \tau)$ :

$$F_{mn}^i(T, \tau) = \int_0^{\tau} S_{mn}(\tau') b_i^n(\tau') d\tau' \quad (15)$$

当  $m \neq n$  时, 逐次进行分部积分有

$$F_{mn}^i(T, \tau) = \frac{1}{T} G_{mn}(\tau) b_i^n(\tau) + \frac{1}{T^2} P_{mn}(\tau) \frac{d}{d\tau} [K_{mn}(\tau) b_i^n(\tau)] + O\left(\frac{1}{T^3}\right) \quad (16)$$

其中

$$\begin{aligned} G_{mn}(\tau) &= \frac{\hbar \beta_{mn}(\tau)}{i[\varepsilon_m[S(\tau)] - \varepsilon_n[S(\tau)]]} \cdot e^{iT\alpha_{mn}(\tau)} \\ K_{mn}(\tau) &= - \frac{\hbar \beta_{mn}(\tau)}{\varepsilon_m[S(\tau)] - \varepsilon_n[S(\tau)]}, \quad P_{mn}(\tau) = \frac{\hbar \exp[iT\alpha_{mn}(\tau)]}{\varepsilon_m(\tau) - \varepsilon_n(\tau)} \end{aligned}$$

是  $\tau$  的连续函数. 又因为  $\alpha_{mn}(\tau)$  是单调连续的, 对于无穷缓慢的绝热过程,  $T \rightarrow \infty$ ,

$F$  趋向一个对角矩阵. 对于  $T$  很大的缓变过程,  $\frac{1}{T}$  是一个小量. (16)代入(14), 则有

$$\begin{aligned} b_i^m(\tau) &= \delta_i^m - \int_0^{\tau} S_{mm}(\tau') b_i^m(\tau') d\tau' - \frac{1}{T} \sum_{m \neq n} G_{mn}(\tau) b_i^n(\tau) \\ &\quad - \frac{1}{T} \sum_{m \neq n} \frac{d}{d\tau} [K_{mn}(\tau) b_i^n(\tau) P_{mn}(\tau)] + O\left(\frac{1}{T^3}\right) \end{aligned} \quad (17)$$

相应的微分方程组是

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} b_i^m(\tau) + S_{mm}(\tau)b_i^m(\tau) = & -\frac{1}{T} \sum_{n \neq m} \frac{d}{d\tau} [G_{mn}(\tau)b_i^n(\tau)] \\ & - \frac{1}{T^2} \sum_{n \neq m} \left\{ P_{mn} \frac{d}{d\tau} [K_{mn}(\tau)b_i^n(\tau)] \right\} \\ & + O\left(\frac{1}{T^3}\right) \end{aligned} \quad (18)$$

按着  $\frac{1}{T}$  的级次讨论所谓的准绝热近似, 设

$$b_i^m(\tau) = b_i^{[0]m}(\tau) + \frac{1}{T} b_i^{[1]m}(\tau) + \frac{1}{T^2} b_i^{[2]m}(\tau) + \dots \quad (19)$$

代入(18)并比较  $\frac{1}{T}$  的同次项系数可得

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d}{d\tau} b_i^{[0]m}(\tau) + S_{mm}(\tau)b_i^{[0]m}(\tau) = 0 \end{aligned} \right. \quad (20-1)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d}{d\tau} b_i^{[1]m}(\tau) + S_{mm}(\tau)b_i^{[1]m}(\tau) = - \sum_{n \neq m} \frac{d}{d\tau} [G_{mn}(\tau)b_i^{[0]n}(\tau)] \end{aligned} \right. \quad (20-2)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d}{d\tau} b_i^{[2]m}(\tau) + S_{mm}(\tau)b_i^{[2]m}(\tau) = & - \sum_{n \neq m} \frac{d}{d\tau} [G_{mn}(\tau)b_i^{[1]n}(\tau)] \\ & + \sum_{n \neq m} \frac{d}{d\tau} \left[ P_{mn}(\tau) \frac{d}{d\tau} [K_{mn}(\tau)b_i^{[0]n}(\tau)] \right] \end{aligned} \right. \quad (20-3)$$

初值条件是  $b_i^{[0]n}(0) = \delta_{in}$ ,  $b_i^{[i]n}(0) = 0$ ,  $i = 1, 2, 3, \dots$ . 上述方程可逐次求解.

$$\left\{ \begin{aligned} b_i^{[0]m}(\tau) &= \delta_{mi} \exp \left[ - \int_0^\tau S_{mm}(\tau') d\tau' \right] \\ b_i^{[1]m}(\tau) &= \exp \left[ - \int_0^\tau S_{mm}(\tau') d\tau' \right] \int_0^\tau f_{mi}^{[1]}(\tau') \exp \left[ \int_0^{\tau'} S_{mm}(\tau'') d\tau'' \right] d\tau' \\ b_i^{[2]m}(\tau) &= \exp \left[ - \int_0^\tau S_{mm}(\tau') d\tau' \right] \int_0^\tau f_{mi}^{[2]}(\tau') \exp \left[ \int_0^{\tau'} S_{mm}(\tau'') d\tau'' \right] d\tau' \\ &\dots \end{aligned} \right. \quad (21)$$

其中,

$$f_{mi}^{[1]}(\tau) = \sum_{n \neq m} \frac{d}{d\tau} [G_{mn}(\tau)b_i^{[0]n}(\tau)]$$

$$f_{mi}^{[2]}(\tau) = \sum_{n \neq m} \left[ \frac{d}{d\tau} G_{mn}(\tau)b_i^{[1]n}(\tau) + P_{mn}(\tau) \frac{d}{d\tau} [K_{mn}(\tau)b_i^{[0]n}(\tau)] \right].$$

按上述讨论, 我们可以根据需要计算到任意级.

## 五、绝热条件破坏的 Berry 相因子的几何解释和可观察效应

得到了  $U(t_0, t)$  的近似解, 我们将在 Schrödinger 表象中讨论问题.

分析上述讨论中的各级解, 我们不难看到 Berry 相因子的普适性.



一个绕  $\mathbf{B}$  方向以  $\theta$  角和  $\omega$  角速度进动着的磁场  $\mathbf{B}'(t)$  ( $|\mathbf{B}'(t)| = \mathbf{B}$ ), 最后在双缝的垂直平分线的 0 点上相干. 根据 Berry 的讨论, 绝热条件下 0 点的相干强度 (对应于检测器的计数率) 对进动角  $\theta$  的关系为

$$I(\theta) = \cos^2[\pi(1 - \cos\theta)] \quad (27)$$

根据本文的讨论,  $T$  有限时, 一级近似对  $I(\theta)$  的修正将是

$$I'(\theta) = \cos^2[\pi(1 - \cos\theta)] + \frac{1}{4} \lambda^2 \left[ \sin\theta \sin \left[ \pi \left( \cos\theta - \frac{2}{\lambda} \right) \right] \frac{1 + \frac{1}{4} \lambda [1 - \cos\theta]}{1 - \frac{1}{2} \lambda \cos\theta} \right]^2 \quad (28)$$

其中  $\lambda = \frac{\omega}{\omega_0} = \omega / \frac{1}{2} \mu_B |B|$  标志着  $\mathbf{B}'$  进动的快慢, 通过比较(28)和实验测得  $I'$  对  $\theta$  的依赖关系, 可以验证我们的结论. 当然, 当  $T$  变小即体系的哈密顿变化较快时, 我们应考虑更高级的修正.

完成本文的过程中, 得到了吴兆颜先生的热情帮助. 他的帮助使作者受益匪浅, 作者深表谢意.

### 参 考 文 献

- [1] Berry M. V. *Proc. R. Soc. Lond.*, A 392(1984), 4; Simon B. *Phys. Rev. Lett.*, 54(1983), 2167.
- [2] Aharonov Y and Bohm D *Phys. Rev.*, 115(1959), 485.
- [3] Aharonov Y and Sussikind L *Phys. Rev.*, 159(1967), 1237.
- [4] Delacretaz G et al *Phys. Rev. Lett.*, 56(1986), 2598.
- [5] Chiao R Y and Wu Y S *Phys. Rev. Lett.*, 57(1986), 933 Tomito A and Chiao R Y *Phys. Rev. Lett.*, 57(1986), 937.
- [6] Nelson P and Alvarez-Gaume L *Comm. Math. Phys.*, 99(1985), 103; Sonoda H *Nucl. Phys.*, B266(1986), 173; Niemi A J, Semenoff G W and Wu Y S *Nucl. Phys.*, B266(1986), 410.
- [7] Semenoff G W and Sodano P *Phys. Rev. Lett.*, 57(1986), 1159.  
Mead C A and Truhlar D G *J. Chem. Phys.*, 70(1979), 2284.
- [8] Berry M V *J. Phys. A: Math. Gen.*, 18(1985), 15; Hannay J H *J. Phys. A: Math. Gen.*, 18(1985), 221;  
Gozzi E and Thacker W D 1987 MPI preprint MIP-PAE/PTH 67/86.
- [9] Messiah A *Quantum Mechanics*, Vol 2(1962), (North Holland: Amsterdam).

## QUASI-ADIABATIC APPROXIMATION FOR THE SLOWLY-CHANGING QUANTUM PROCESS AND BERRY PHASE FACTOR

SUN CHANGPU

(Northeast Normal University, Changchun)

### ABSTRACT

By using group representation theory, the quasi-adiabatic approximation solution of the Schrödinger equation of a quantum system with slowly-changing Hamiltonian are presented in this paper. We not only obtained the Berry phase factor and strictly proved the quantum adiabatic theorem as the zeroth-order approximation, but also studied the universal Berry phase factor and its geometrical interpretation when the adiabatic condition is violated. It is pointed out that this universal Berry phase factor has observable effects.