

含时边界条件和 Berry 相位

刘 登 云

山西师范大学物理系, 临汾 041004

1992年8月3日收到

对一具有含时边界条件的量子体系, 有效哈密顿算符可用一种简单的方式去构造而不涉及任何几何处理. 用这种方法构造了一个在半径随时间变化的球形盒子内的量子粒子的有效哈密顿算符, 并用它来计算波函数的 Berry 相位. 发现有效哈密顿算符与原哈密顿算符在形式上由一静态规范变换相关联. 这两个哈密顿算符的量子态差 Berry 相位.

PACC: 0365

一、引 言

1984年 Berry^[1]指出, 当一量子体系处在一本征态, 而体系的哈密顿算符所依赖的参量缓慢地沿一闭合回路 c 变化时, 除了熟知的动力学相位 $\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'\right\}$ 之外, 波函数还要求一个附加的几何相位 $\exp\{i\gamma(c)\}$, 它只依赖于参量空间的几何和路径. Simon^[2]立即给予 Berry 相位一拓扑意义, 把它看成是复矢量丛的 holonomy. Wilczek 和 Zee^[3]证明非阿贝耳规范场怎样发生在一个简单量子体系的绝热演化中. 最近, Liang 和 Diang^[4]指出 Berry 相位明显地依赖于随时间变化的量子体系的历史, 即 Berry 相位不仅由瞬时哈密顿算符而且由初条件来决定.

近年来, 多数有关 Berry 相位的研究工作都把注意力集中在具有含时哈密顿算符的量子体系上, 而不太注意边界条件可能产生的影响. 1989年 Razary^[5]讨论了一个穿过颈缩 (constriction) 的粒子的波函数的相移与边界的几何形状有关. 最近 Pereshogen 和 Pronin^[6]研究了一个具有非稳定边界条件的一维量子体系, 他们首先通过几何的方法变体系原来的哈密顿算符为一有效哈密顿算符, 然后计算了波函数额外的几何相因子.

本文指出, 对一具有含时边界条件的量子体系, 一般而言, 可以在量子基础理论的框架下通过一种简单方式去构造该体系的有效哈密顿算符而不涉及任何几何处理. 正如将要看到的, 应用这种方法于具有一运动阱壁的一维无限深势阱, 所得到的有效哈密顿算符与文献[6]的完全相同. 一维情况仅作为本文所考虑体系的角量子数 $l=0$ 的特例. 本文计算 Berry 相位的方法及结果与文献[6]明显不同.

二、有效哈密顿算符

首先给出构造具有含时边界条件的量子体系的有效哈密顿算符的方法. 描述势场范围的参量诸如宽度、半径等, 通过势能函数或边界条件最终会保留在能量本征值和本征函

数表述中. 因此, 除了位置和时间变量外, 可在能量本征函数中写入一个参量 a , $\psi_n(x, t; a)$, 并将能量本征值记为 $E_n(a)$. 我们感兴趣的是当 a 含在边界条件中且随时间变化时, 体系原来的哈密顿算符 $\hat{H}^{(0)}$ 将由一有效哈密顿算符所取代. 尤其是在绝热近似下, 有效哈密顿算符将导致量子体系的波函数附加一个 Berry 相位.

现在考虑一个被束缚在一维势场 $V(x)$ 内质量为 M 的粒子, 在 $0 \leq x \leq a(t)$ 内势函数等于零, 别处为无穷大. 哈密顿算符为

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{\hat{p}^2}{2M} \quad 0 \leq x \leq a(t), \quad (1)$$

$t=0, a(0)=a_0$, 稳定边界条件, 体系处于稳定态. 能量本征函数

$$|\psi_n(x, t; a_0)\rangle = |n(x, a_0)\rangle \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E_n(a_0) t\right\} \quad (2)$$

构成完备基底, 波函数 $|\psi(x, t)\rangle$ 可按它展开

$$|\psi(x, t)\rangle = \sum_n C_n |\psi_n(x, t; a_0)\rangle, \quad (3)$$

系数 C_n 与时间无关,

$$C_n = \langle \psi_n(x, 0; a_0) | \psi(x, 0) \rangle, \quad (4)$$

波函数 $|\psi(x, t)\rangle$ 满足含时 Schrödinger 方程

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(x, t)\rangle = \hat{H}^{(0)} |\psi(x, t)\rangle, \quad (5a)$$

即 $|\psi_n(x, t; a_0)\rangle$ 满足

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(x, t; a_0)\rangle = \hat{H}^{(0)} |\psi_n(x, t; a_0)\rangle. \quad (5b)$$

当 $t > 0, x = a(t)$ 处为非稳定边界. 这时, 瞬时能量本征态记为

$$|\psi_n(x, t; a(t))\rangle = |n(x, a(t))\rangle \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(a(t')) dt'\right\}, \quad (6)$$

其中 $|n(x, a(t))\rangle$ 为本征值方程

$$\hat{H}^{(0)} |n(x, a(t))\rangle = E_n(a(t)) |n(x, a(t))\rangle \quad (7)$$

的解, 它不显含时间.

按对偏导数的朴素的理解, 作用算符 $(i \hbar \frac{\partial}{\partial t})$ 于瞬时能量本征态 $|\psi_n(x, t; a(t))\rangle$ 上, 有

$$\begin{aligned} i \hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(x, t; a(t))\rangle \\ = \{[E_n(a(t)) + i \hbar \dot{a}(t) \nabla_{a(t)}] |n(x, a(t))\rangle\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(a(t')) dt'\right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

同时考虑到 $|n(x, a(t))\rangle$ 的归一化因子 N 和波数 k , 它与无量纲变量 ξ 有关系 $\xi = kx$, 都可能是参量 $a(t)$ 的函数, 改写关于参量 $a(t)$ 的梯度算符为

$$\begin{aligned} \nabla_{a(t)} &= \nabla_{a(t)} \ln N + \frac{\partial}{\partial a(t)} \nabla_{\xi} \\ &= \nabla_{a(t)} \ln N + (\nabla_{a(t)} \ln K) x \cdot \nabla_x, \end{aligned} \quad (9)$$

将(9)式代入方程(8), 得

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(x, t; a(t))\rangle = \hat{H}_{\text{eff}} |\psi_n(x, t; a(t))\rangle, \quad (10)$$

其中

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}^{(0)} + i\hbar \dot{a}(t) [\nabla_{a(t)} \ln N + (\nabla_{a(t)} \ln K) x \cdot \nabla_x] \quad (11)$$

被称为有效哈密顿算符. 这里方程(7)已被使用.

作为 $\hat{H}^{(0)}$ 的本征值方程的解, $|\psi_n(x, t; a(t))\rangle$ 一般不是 $\hat{H}_{\text{eff}}$ 的能量本征态, 因为在 $\hat{H}_{\text{eff}}$ 中存在一个正比于 $\dot{a}(t)$ 的附加项. 假定存在一个完备的函数组 $|\Phi_n(x, t; a(t))\rangle$, 它是有效哈密顿算符 $\hat{H}_{\text{eff}}$ 具有本征值 $E_n(a(t))$ 的本征态

$$\hat{H}_{\text{eff}} |\Phi_n(x, t; a(t))\rangle = E_n(a(t)) |\Phi_n(x, t; a(t))\rangle. \quad (12)$$

可用它作为基底将波函数 $|\psi(x, t; a(t))\rangle$ 展开

$$|\psi(x, t; a(t))\rangle = \sum_n b_n(t) |\Phi_n(x, t; a(t))\rangle, \quad (13)$$

波函数 $|\psi(x, t; a(t))\rangle$ 满足新的 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(x, t; a(t))\rangle = \hat{H}_{\text{eff}} |\psi(x, t; a(t))\rangle. \quad (14)$$

在(11)式给出的关于一维问题的有效哈密顿算符的表述不难推广到具有含时边界条件的三维量子体系. 作为例子, 考虑一量子粒子在一具有随时间变化半径的球形盒子内的问题. 势能函数为

$$V(r) = \begin{cases} 0, & 0 \leq r \leq a(t); \\ \infty & \text{别处.} \end{cases} \quad (15)$$

原径向哈密顿算符和能量本征态分别为

$$\hat{H}_r^{(0)} = \frac{\hat{p}_r^2}{2M} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} \quad 0 \leq r \leq a(t) \quad (16)$$

$$|R_l(r)\rangle = N_l j_l(k(t)r), \quad (17)$$

其中 $\hat{p}_r = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$ 为径向动量算符, $j_l(kr)$ 为 l 阶球贝塞耳函数, $k(t) = \sqrt{2ME(a(t))}/\hbar$ 可由边界条件

$$|R_l(k(t)a(t))\rangle = 0 \quad \text{即} \quad |j_l(k(t)a(t))\rangle = 0 \quad (18)$$

确定,

$$k_l(t) = \chi_{n,l}/a(t),$$

$\chi_{n,l}$ 为 l 阶球贝塞耳函数的第 n 个根, n 为径向量子数. N_l 为归一化系数,

$$N_l(a(t)) = \left[\frac{-2}{a^3(t)} j_{l-1}(\chi_{n,l}) j_{l+1}(\chi_{n,l}) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (19)$$

因为不同 l, l' 和 m, m' 的正交性已为角部波函数所保证, 所以同阶的球贝塞耳函数满足正交关系

$$\langle R_l(k'(t)r) | R_l(k(t)r) \rangle = \delta_{k'k}, \quad (20)$$

将 $k_l(t)$ 和 $N_l(t)$ 的表述式代入(11)式得

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_r^{(0)} + \frac{\dot{a}(t)}{2a(t)} [\hat{p}_r r + r \hat{p}_r] \quad (21)$$

令 $\mathcal{A}(r, t) = -\frac{MC\dot{a}(t)}{qa(t)}r$, 可改写(21)式为

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{eff}} &= \frac{\hat{p}_r^2}{2M} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} + \frac{i\hbar q}{Mc} \left(\mathcal{A}(r, t) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial r} \mathcal{A}(r, t) \right) \\ &\approx \frac{1}{2M} \left(\hat{p}_r - \frac{q}{c} \mathcal{A}(r, t) \right)^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2}\end{aligned}\quad (22)$$

可将它近似地看成是一个质量为 M 、电荷为 q 的粒子在由矢势 $\mathcal{A}(r, t)$ 描述的电磁场中运动的哈密顿算符, 因为只考虑半径缓慢的变化, $\mathcal{A}(r, t)$ 的二阶项可忽略.

将(22)式与(16)式比较, 可以看到, 有效哈密顿算符与原哈密顿算符之间在形式上由一静态规范变换相关联

$$\hat{H}_{\text{eff}} = U(t) \hat{H}_r^{(0)} U^{-1}(t) \quad (23)$$

其中 $U(t) = \exp\{i f(t)\}$ 具有规范函数 $f(t) = \frac{q}{\hbar c} \int \mathcal{A}(r, t) dr = -\frac{M \dot{a}(t)}{2 \hbar a(t)} r^2$. 因此, 有效哈密顿算符的能量本征态在此规范下为

$$\begin{aligned}|\Phi_l(r, t; a(t))\rangle &= U(t) |R_l(k(t)r)\rangle \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_l(a(t')) dt'\right\} \\ &= \exp\left\{-i \frac{M \dot{a}(t)}{2 \hbar a(t)} r^2\right\} |R_l(k(t)r)\rangle \exp\left\{\frac{-i}{\hbar} \int_0^t E_l(a(t')) dt'\right\}.\end{aligned}\quad (24)$$

这是规范场以非常自然的方式出现于具有含时边界条件的量子体系的又一个例子.

三、Berry 相位

在本文考虑的体系中, 可由(24)式仅当 $a(t)$ 作缓慢地周期性变化 $a(t) = a_0 + a'_0 \sin \varphi(t)$ 时, 得

$$\begin{aligned}\gamma_l &= - \int_0^T \langle R_l(k(t)r) | \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{M \dot{a}(t) r^2}{2 \hbar a(t)} \right) | R_l(k(t)r) \rangle dt \\ &= \frac{M}{\hbar} (A_{l-1} + A_{l+1}) \int_0^T [a(t) d\dot{a}(t) - \dot{a}(t) da(t)] \\ &= -\frac{4M}{\hbar} (A_{l-1} + A_{l+1}) a'_0 \alpha \pi\end{aligned}\quad (25)$$

其中

$$\int_0^T [\dot{a}(t) da(t) - a(t) d\dot{a}(t)] = a'^2_0 \alpha \int_0^{2\pi} d\varphi = 2a'^2_0 \alpha \pi,$$

a'_0 为 $a(t)$ 的最大变化, $a'_0 < a_0$, $\alpha = \frac{d\varphi(t)}{dt} = \text{const}$ 为一小量. 若把 $a(t)$ 和 $\dot{a}(t)$ 分别看作参量 $\mathbf{b}(t)$ 的两个分量, 那么现在的参量空间是一个被打孔的平面 $M(\mathbf{b}) = \mathbf{b}^2 - \{0\}$, 它有非平庸拓扑, $\varphi(t)$ 为极角. 这个 Berry 相位是由绕在参量空间 $M(\mathbf{b})$ 上的孔转一周的 anholonomy 引起的结果.

$$\begin{aligned}A_{l-1} &= \frac{\chi_{n,l} \chi_{n,l-1}}{(\chi_{n,l}^2 - \chi_{n,l-1}^2)^2} \frac{(l+1)(l-1)}{(2l+1)(2l-1)}, \\ A_{l+1} &= \frac{\chi_{n,l} \chi_{n,l+1}}{(\chi_{n,l}^2 - \chi_{n,l+1}^2)^2} \frac{l(l+2)}{(2l+1)(2l+3)}\end{aligned}\quad (26)$$

而且

$$\langle R_l(k(t)r) | r^2 | R_l(k(t)r) \rangle = 4a^2(t)(A_{l-1} + A_{l+1}). \quad (27)$$

此外,还利用了公式

$$\langle R_{l'}(k(t)r) | r | R_l(k(t)r) \rangle = \frac{i2a(t)}{\hbar} \frac{\langle R_{l'}(k(t)r) | \hat{p}_r | R_l(k(t)r) \rangle}{(\chi_{n,l'}^2 - \chi_{n,l}^2)}. \quad (28)$$

如令 $l=0$ 并作代换 $|R(r)\rangle = |n(r)\rangle/r$, 可以化该问题为一维问题, 如文献[6]所讨论的. 由它的瞬时能量本征态

$$|n(x, a(t))\rangle = \sqrt{\frac{2}{a(t)}} \sin \frac{n\pi x}{a(t)} \quad 0 \leq x \leq a(t) \quad (29)$$

可知, 归一化系数和波数分别为

$$N_n = \sqrt{\frac{2}{a(t)}}, \quad k_n = n\pi/a(t). \quad (30)$$

将(30)式代入到(11)式, 给出

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{\dot{a}(t)}{2a(t)} [\hat{p}x + x\hat{p}] \quad (31)$$

它与文献[6]的方程(13)完全一致. 考虑到 $\dot{a}(t)$ 为小量, 近似地改写(31)式为

$$\hat{H}_{\text{eff}} \approx \frac{1}{2M} \left[\hat{p} - \frac{q}{c} \mathcal{A}(x, t) \right]^2, \quad (32)$$

于是相应的能量本征函数为

$$|\Phi_n(x, t; a(t))\rangle = \sqrt{\frac{2}{a(t)}} \exp \left\{ -\frac{iM\dot{a}(t)}{2\hbar a(t)} x^2 - \frac{in^2\pi^2\hbar}{2M} \int_0^t \frac{dt'}{a^2(t')} \right\} \sin \frac{n\pi x}{a(t)}. \quad (33)$$

由此重复导致(25)式的步骤, 可求得波函数的 Berry 相位

$$\begin{aligned} \gamma_n &= \frac{M}{2\hbar} \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\pi^2} \right) \int_0^T [a(t)d\dot{a}(t) - \dot{a}(t)da(t)] \\ &= \frac{M}{\hbar} \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\pi^2} \right) a'^2_0 \alpha \pi, \end{aligned} \quad (34)$$

其中已使用了

$$\langle n(x, a(t)) | x^2 | n(x, a(t)) \rangle = \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n^2} \right) a^2(t). \quad (35)$$

很明显, 本文结果与文献[6]的不同.

四、结 语

由上述可知, 含时边界条件的确导致了波函数的 Berry 相位. Berry 相位是直接由有效哈密顿算符得到的. 有效哈密顿算符在形式上可看作是对原哈密顿算符经过一个静态规范变换的结果, 因而这两个哈密顿算符的量子态相差一个 Berry 相位. 值得注意, 有效哈密顿算符既不是对原哈密顿算符的么正变换, 又不是对原哈密顿算符的含时规范变换, 它描述的是一个“新的”量子体系, 就本文所考虑的例子而言, 是质量为 M 、电荷为 q 的粒子与电磁矢势 $\mathcal{A}(r, t)$ 相互作用的量子体系.

不同于文献[6],本文没有采用几何处理的方法,而是将边界条件中的含时参量引入到瞬时能量本征函数中,从而得到有效哈密顿算符的表达式(11).我们相信,与几何方法相比,本文构造有效哈密顿算符的方法更便于推广和应用.

- [1] M. V. Berry, *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A* **392**(1984)45.
- [2] B. Simon, *Phys. Rev. Lett.*, **51**(1983), 2167.
- [3] F. Wilczek and A. Zee, *Phys. Rev. Lett.*, **52**(1984), 2111.
- [4] J. Q. Liang and X. X. Diang, *Phys. Lett.*, **A153**(1991), 273.
- [5] M. Razary, *Phys. Rev.*, **A40**(1989), 1.
- [6] P. Reresbogen and P. Pronin, *Phys. Lett.*, **A156**(1991), 12.

TIME DEPENDENT BOUNDARY CONDITIONS AND BERRY PHASE

LIU DENG-YUN

Department of Physics, Shanxi Teachers University, Linfen 041004

(Received 3 August 1992)

ABSTRACT

For a quantum system with time dependent boundary conditions, it is shown that the effective Hamiltonian can be constructed in a simple way without any geometric treatment. In this paper the effective Hamiltonian, constructed in the above way, of quantum particle in a spherical box of varying radius is used to calculate the Berry phase of the wave function. We found that the effective Hamiltonian and original one are formally related with a static gauge transformation, the quantum states of the two Hamiltonians differ by a Berry phase.

PACC: 0365