

非零几何位相存在的条件及其计算公式^{*}

李春芳 郭光灿

(中国科学技术大学物理系, 合肥 230026)

(1995年2月7日收到; 1995年4月4日收到修改稿)

给出了一个量子 Hamiltonian 系统存在非零绝热几何位相的必要条件: 不同时刻的 Hamiltonian 量不可对易. 我们指出, 约束条件 $\langle n'(t) | \frac{d}{dt} | n'(t) \rangle = 0$ 唯一地确定了归一化本征态矢 $|n'(t)\rangle$ 在不同时刻的位相关系, 并且在此基础上讨论了非零绝热几何位相存在的充分必要条件: 当 $\langle n'(t) | \frac{d}{dt} | n'(t) \rangle = 0$ 时, $|n'(T)\rangle \neq |n'(0)\rangle$; 给出了计算绝热几何位相的普遍的时间积分公式. 作为该公式的应用, 计算了 Solem 和 Biedenharn 讨论过的自旋 1/2 系统的绝热几何位相, 并且指出, Solem 和 Biedenharn 所遇到的问题源于本征态矢在参数空间中的多值性.

PACC: 0365

1 引 言

自从 Berry 于 1984 年在量子 Hamiltonian 系统(H-系统)的周期性绝热演化过程中发现几何位相^[1]以来, 人们在诸如中子干涉、核磁共振、量子 Hall 效应、原子分子物理、光学、凝聚态物理以及规范场论等各个领域^[2,3]对几何位相做了广泛深入的研究. 此外, 在量子光学^[4]和耗散系统^[5]中也存在几何位相, 在经典 H-系统^[6]中有几何位相的对应物.

1989 年 Gerbert^[7]基于正则变换对几何位相的作用将 H-系统作了如下的分类: (1) 不存在几何位相的 H-系统; (2) 几何位相虽然存在, 但可以由正则变换变换掉的 H-系统; (3) 几何位相存在, 且不能由正则变换变换掉的 H-系统. 这样自然地就提出了一个问题: 什么样的 H-系统存在几何位相? 或者说, 存在非零几何位相的 H-系统应满足什么条件? 最近, Ihm^[8]分析了 Hamiltonian 量的时间反演对称性破缺和非零几何位相的关系, 但是所得结果是很复杂的. 例如, 当 Hamiltonian 量不具有时间反演对称性时, 在参数空间中存在某些闭合曲线, 对于这些曲线存在非零几何位相. 但是什么样的曲线对应于非零几何位相并不清楚. 因此, 对于一个给定的不具有时间反演对称性的量子 H-系统, 还是无法判断它是否存在非零几何位相. 例如, 一个在外磁场中的自旋 1/2 系统, 其 Hamiltonian 量为 $H = \mu\sigma \cdot B$, 该系统不具有时间反演对称性, 当 B 的大小变化而方向不变时, 该系统不存在非零几何位相, 此时有 $[H(t), H(t')] = 0$; 而当 B 的大小不变其方向发生变化时, 该系

^{*} 国家自然科学基金资助的课题.

统存在非零几何位相, 此时有 $[H(t), H(t')] \neq 0$. 本文的第二部分将从不同时刻的 Hamiltonian 量的对易关系的角度讨论非零几何位相存在的必要条件. 如 Ihm 的工作那样, 这里仅限于讨论周期绝热演化过程中的几何位相.

另外, Berry 给出的在参数空间中计算几何位相的环路积分公式^[1]

$$\gamma_n = \oint \langle n(\mathbf{R}) | i \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle \cdot d\mathbf{R} \quad (1)$$

要求 Hamiltonian 量的本征态矢 $|n(\mathbf{R})\rangle$ 在参数空间中是单值的^[1,9]. 这里有两方面的原因, 第一, 只有在 $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$ 为单值的情况下, 才可以比较绝热过程中初态 ($t=0$) 和终态 ($t=T$) 的态矢, 从而定义几何位相 γ_n ^[1]; 第二, 只有在 $|n(\mathbf{R})\rangle$ 为单值的情况下, 态矢的梯度 $|\nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R})\rangle$ 才有定义 (Aharonov 和 Anandan 引入的非绝热几何位相的计算公式具有类似的要求^[9,10], 即 $|\tilde{\Psi}(T)\rangle = |\tilde{\Psi}(0)\rangle$). 遗憾的是, (1) 式对 $|n(\mathbf{R})\rangle$ 的单值性要求往往被忽略了. 例如 Solem 和 Biedenharn^[11] 在讨论磁场中的自旋 1/2 系统的几何位相时, 从参数空间中的多值本征态矢出发得到了与熟知的结果不同的结论, 为了解决这一矛盾, 不得不借助于此多值性产生的奇异性, 并且将此问题归因于坐标系的使用 (the use of coordinates) 问题. 事实上, 如我们将要看到的那样, 只要注意到本征态矢在参数空间中的这种多值性, 问题便迎刃而解.

为了克服 (1) 式对本征态矢在参数空间中的单值性要求所带来的不便与困难, Berry^[1] 将其转化为面积分形式:

$$\gamma_n = - \iint_c d\mathbf{S} \cdot \mathbf{V}_n(\mathbf{R}), \quad (2)$$

其中

$$\mathbf{V}_n(\mathbf{R}) \equiv \text{Im} \sum_{m=n} \frac{\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} H(\mathbf{R}) | m(\mathbf{R}) \rangle \times \langle m(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} H(\mathbf{R}) | n(\mathbf{R}) \rangle}{(E_m(\mathbf{R}) - E_n(\mathbf{R}))^2}$$

虽然该表达式不要求 $|m(\mathbf{R})\rangle$ 和 $|n(\mathbf{R})\rangle$ 是单值的, 但计算起来较为复杂, 并且为了计算与 $|n(\mathbf{R})\rangle$ 相对应的几何位相 γ_n , 需要获得 Hamiltonian 量 $H(\mathbf{R})$ 所有的本征态矢. 本文在讨论几何位相存在条件的同时, 给出了一个计算几何位相的简单的时间积分公式, 该公式 (i) 不要求所涉及的本征态矢是时间的周期函数 (态矢在参数空间中的单值性等价于在时间上的周期性); (ii) 仅包含所涉及的单一本征态矢. 关于非绝热几何位相的计算问题, 可参阅文献 [9].

2 非零几何位相存在的必要条件及类定态解

考虑一个量子系统, 其 Hamiltonian 量 H 在 Schrödinger 图像中不显含时间, 如所周知, 如果该系统的初始态为 H 的本征态 $|n\rangle$, 能量为 E_n , 那么在以后任何时刻其态矢为 $\exp(-iE_n t/\hbar)|n\rangle$, 能量保持 E_n 不变. 相反, 如果一个量子系统的 Hamiltonian 量是时间 t 的缓变函数 $H(t)$, 其瞬时本征态矢为 $|n(t)\rangle$, 相应的本征能量为 $E_n(t)$, 那么根据绝热定理, 若该系统初始时刻处在 $H(0)$ 的本征态 $|n(0)\rangle$, 则在以后任何时刻 t , 其状态是 $\exp\left\{(-i/\hbar) \int_0^t E_n(t') dt'\right\} \exp\{i\gamma_n(t)\} |n(t)\rangle$, 其中 $\gamma_n(t) = \int_0^t \langle n(t') | i \frac{d}{dt'} | n(t') \rangle dt'$,

它是 $H(t)$ 的本征态. 现在让 $H(t)$ 作周期演化, $H(T) = H(0)$ (周期 T 足够大). Berry^[1]发现, 当 $H(t)$ 演化一周回到初始值时, 系统的态矢相对于初始态矢获得了一个位相. 该位相由两部分组成, 一部分称为动力学位相 $\left[(-i/\hbar) \int_0^T E_n(t) dt\right]$, 它是定态问题中动力学位相的推广; 另一部分即是几何位相,

$$\gamma_n = \int_0^T \langle n(t) | i \frac{d}{dt} | n(t) \rangle dt, \quad (3)$$

其中 $|n(t)\rangle$ 满足周期性条件 $|n(T)\rangle = |n(0)\rangle$. 之所以称 γ_n 为几何位相, 是因为若将 $H(t)$ 参数化, 那么 γ_n 由参数空间中的几何路径决定 (见(1)式). 但是, 并不是所有的含时周期 H-系统都存在几何位相. 容易证明, 若 $H(t)$ 满足对易关系:

$$[H(t), H(t')] = 0 \quad 0 \leq t, \quad t' \leq T, \quad (4)$$

则几何位相必为零. 证明虽然非常简单, 但就作者所知, 从这个角度讨论几何位相的尚未见报道. 为了完整起见, 这里简要地给出证明过程.

设初始时刻系统的态矢 $|\Psi(0)\rangle$ 为 $H(0)$ 的某本征态 $|n(0)\rangle$, $|\Psi(0)\rangle = |n(0)\rangle$, 则在条件(4)下, Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle \quad (5)$$

的解为

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left\{(-i/\hbar) \int_0^t H(t') dt'\right\} |n(0)\rangle.$$

根据条件(4)知, $H(0)$ 的本征态 $|n(0)\rangle$ 也是 $H(t)$ 的本征态

$$H(t) |n(0)\rangle = E_n(t) |n(0)\rangle,$$

从而有

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left\{(-i/\hbar) \int_0^t E_n(t') dt'\right\} |n(0)\rangle. \quad (6)$$

可见, 态矢 $|\Psi(t)\rangle$ 获得的位相是纯动力学位相, 几何位相等等于零.

这里需要进一步说明如下三点:

(1) 由于在 $H(t)$ 的演化过程中, $|n(0)\rangle$ 始终是它的本征态矢, (6) 式不依赖于绝热过程, 因此 $H(t)$ 的本征态既不存在绝热位相, 也不存在非绝热位相. 这就是说, 绝热定理仅对满足条件 $[H(t), H(t')] \neq 0$ 的量子系统才有实质性意义;

(2) (6) 式表明, 若系统初始时刻处在 $H(0)$ 的本征态, 则在条件(4)下, 该系统的态矢 (除去一个动力学位相因子外) 不变, 这种形式的解我们称之为类定态解, 它和不含时的 H-系统的定态解的相同之点是保持系统的量子态矢不变, 不同之点是系统的能量随时变化.

(3) (6) 式表明, 满足条件(4)的 H-系统不存在几何位相, 因此, 一个量子系统存在非零几何位相的必要条件是其 Hamiltonian 量满足

$$[H(t), H(t')] \neq 0 \quad 0 \leq t, \quad t' \leq T. \quad (7)$$

3 非零几何位相存在的充分必要条件及其计算

根据以上的分析可知,若一个周期 H-系统满足条件(7),则该系统可能存在几何位相,其表达式为(3)式,其中除了要求 $H(t)$ 的本征态矢 $|n(t)\rangle$ 满足周期性条件(及可微性)之外,没有任何其他限制.下面我们据此表达式来讨论 γ_n 不为零的充分必要条件,并给出当本征态矢不满足周期性条件时的计算公式.

首先,对于一个给定的周期 H-系统,一般情况下由本征方程 $H(t)|n'(t)\rangle = E_n(t)|n'(t)\rangle$ 求出的任一归一化本征态矢 $|n'(t)\rangle$ 不一定满足周期性条件(这里 $|n'(t)\rangle$ 代表不满足周期性条件的本征矢,以区别满足周期性条件的本征矢 $|n(t)\rangle$).其次,一方面,当对本征态矢 $|n'(t)\rangle$ 不附加其他条件时,总可以选择适当的位相使得^[12]

$$\langle n'(t) | \frac{d}{dt} | n'(t) \rangle = 0; \quad (8)$$

另一方面,条件(8)唯一地确定了 $|n'(t)\rangle$ 在不同时刻的位相关系(证明很简单:设 $\exp[i\alpha(t)]|n'(t)\rangle$ 也满足条件(8),则利用(8)式得 $d\alpha(t)/dt = 0$,即 $\alpha = \text{常数}$).下面我们证明,在条件(8)下, $|n'(t)\rangle$ 不满足周期性条件(即 $|n'(T)\rangle \neq |n'(0)\rangle$)是 γ_n 不等于零的充分必要条件.

事实上,在实际的计算过程中, $|n'(t)\rangle$ 可能既不满足条件(8),也不满足周期性条件,但是我们总可以选择适当的位相,求得一个满足周期性条件的本征矢 $|n(t)\rangle$.若

$$|n'(T)\rangle = \exp(i\beta_n) |n'(0)\rangle,$$

令

$$|n(t)\rangle = \exp[i f_n(t)] |n'(t)\rangle, \quad (9)$$

其中 $f_n(T) - f_n(0) = -\beta_n$, 则 $|n(T)\rangle = |n(0)\rangle$. 将(9)式代入(3)式,得

$$\gamma_n = \beta_n + \int_0^T \langle n'(t) | i \frac{d}{dt} | n'(t) \rangle dt. \quad (10)$$

由此可见,若(8)式被满足,则 $\gamma_n = \beta_n$. 另外若 $|n'(t)\rangle$ 不是周期的,则 $\beta_n \neq 0$ (及 2π 的整数倍),因此非零几何位相存在的充分条件是

$$\text{当 } \langle n'(t) | \frac{d}{dt} | n'(t) \rangle = 0 \text{ 时, } |n'(T)\rangle \neq |n'(0)\rangle. \quad (11)$$

另一方面,在条件(8)下,若 $\gamma_n \neq 0$ (及 2π 的整数倍),则必有 $\beta_n \neq 0$ (及 2π 的整数倍),即 $|n'(T)\rangle \neq |n'(0)\rangle$, 可见(11)式也是非零几何位相存在的必要条件¹⁾.

(10)式是计算几何位相的时间积分公式,它不要求本征态矢在时间上的周期性.值得注意的是,正是由于这一点,(10)式等号右边的时间积分不能够转化为参数空间中的闭合曲线的积分,因为参数化后的本征态矢不是参数空间中的单值函数.换言之,如果所用的本征态矢在参数空间中不是单值的,那么几何位相不应该、也不可能仅用一个闭合路径的积分来表示. Solem 和 Biedenharn^[11]所遇到的问题正是忽略了本征态矢的多值性的结果,

1) 作者感谢审稿者指出这一点.

这个问题可以利用(10)式简单地予以解决.下面分析之.

4 磁场中的自旋 1/2 系统

Solem 和 Biedenharn 考虑的是一个自旋 1/2 系统在均匀磁场中的问题,磁场的大小不变,方向缓慢地变化,该系统的 Hamiltonian 量为

$$H(t) = \mu \sigma \cdot B = \mu B \begin{pmatrix} \cos\theta(t) & \sin\theta(t)\exp[-i\varphi(t)] \\ \sin\theta(t)\exp[i\varphi(t)] & -\cos\theta(t) \end{pmatrix}, \quad (12)$$

其中 $0 \leq \theta(t) \leq \pi$, $0 \leq \varphi(t) \leq 2\pi$. 在周期绝热演化过程中,不失一般性可取 $\theta(0) = \theta(T)$, $\varphi(0) = 0$, $\varphi(T) = 2\pi$, 从而 $H(0) = H(T)$, 其中 T 足够大.

$H(t)$ 的本征值为 $E_{\pm} = \pm \mu B$, 它们是不随时间变化的. 若取相应于 $E_+ = \mu B$ 的本征态矢为

$$|\phi_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos[\theta(t)/2] \\ \sin[\theta(t)/2]\exp[i\varphi(t)] \end{pmatrix} \quad (13)$$

(由于在 Solem 和 Biedenharn 使用的 Hamiltonian 量中以 $-\varphi$ 代替了这里的 φ , 因此他们的本征态矢和这里的本征态矢的 φ 相差一个负号), 则该态矢是时间的周期函数, 它在参数空间中是单值的. 利用(10)式可得几何位相 ($\beta_+ = 0$):

$$\gamma_+ = \beta_+ + \int_0^T \langle \phi_+ | i \frac{d}{dt} | \phi_+ \rangle dt = - \int_0^T \frac{d\varphi(t)}{dt} \sin^2 \frac{\theta(t)}{2} dt. \quad (14)$$

如果在绝热演化过程中 θ 不随时间变化, 则有

$$\gamma_+ = -2\pi \sin^2(\theta/2).$$

这与 Berry^[1]的结果是相同的.

反之, 若取相应于 E_+ 的本征态矢为

$$|\phi'_+\rangle = \exp \left\{ -i \int_{\varphi(0)}^{\varphi(t)} \sin^2 \frac{\theta(\varphi')}{2} d\varphi' \right\} |\phi_+\rangle, \quad (15)$$

则 $\langle \phi'_+ | \frac{d}{dt} | \phi'_+ \rangle = 0$, $\beta'_+ = - \int_0^{2\pi} \sin^2[\theta(\varphi')/2] d\varphi'$, 因此有

$$\gamma_+ = \beta'_+ = - \int_0^T \frac{d\varphi}{dt} \sin^2 \frac{\theta}{2} dt.$$

这与(14)式是完全相同的.

另外, 若取相应于 E_+ 的本征态矢为

$$|\phi'_+\rangle = \exp \left\{ -\frac{i}{2} \varphi(t) \right\} |\phi_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta(t)}{2} \exp \left\{ -\frac{i}{2} \varphi(t) \right\} \\ \sin \frac{\theta(t)}{2} \exp \left\{ \frac{i}{2} \varphi(t) \right\} \end{pmatrix}, \quad (16)$$

则该态矢既不是时间的周期函数, $\beta'_+ = -\pi$, 也不满足条件(8), 但是利用(10)式同样可得

$$\gamma_+ = \beta'_+ + \int_0^T \langle \phi'_+ | i \frac{d}{dt} | \phi'_+ \rangle dt = - \int_0^T \frac{d\varphi}{dt} \sin^2 \frac{\theta}{2} dt.$$

但是如 Solem 和 Biedenharn 所做的那样, 如果不注意本征态矢(15)和(16)式在参数空间

中的多值性,而直接将 $\int_0^T \langle \phi_+ | i \frac{d}{dt} | \phi_+ \rangle dt$ 看作几何位相,就会导致不同的结论.这就是说, Solem 和 Biedenharn 的问题可用多值性简单地解决,而无需复杂的奇异性分析.

5 结 论

本文首先从含时 Hamiltonian 量在不同时刻的对易关系的角度给出了绝热几何位相存在的必要条件(7),然后基于归一化本征态矢的性质(8),分析了绝热几何位相存在的充分必要条件(11),并给出了计算几何位相的普遍的时间积分公式(10),该式对所涉及的本征态矢 $|n'(t)\rangle$ 没有任何要求,也不要求除 $|n'(t)\rangle$ 以外的其他本征态矢.利用(10)式分析了 Solem 和 Biedenharn^[11]讨论过的问题,指出该问题的关键在于所利用的本征态矢是参数空间中的多值函数, Solem 和 Biedenharn 指出的奇异性源于这种多值性.

众所周知,物理规律在规范变换下是不变的.如果将(1)式中的 $\langle n | i \nabla_R n \rangle$ 看作参数空间中的势函数,那么就像 Berry^[1]已经指出的那样,本征态矢的规范变换 $|n(\mathbf{R})\rangle \rightarrow \exp[i f(\mathbf{R})] |n(\mathbf{R})\rangle$ 不改变几何位相的表达式,其中 $f(\mathbf{R})$ 在参数空间中是单值的.需要指出的是,(9)式(以及(15)和(16)式)不是本征态矢的规范变换,其原因在于 $f_n(t)$ (以及 $-\int_0^\pi \sin^2[\theta(\varphi')/2] d\varphi'$ 和 $-\varphi/2$) 不是参数空间中的单值函数.这就是说,由(3)到(10)式的转化是不违背规范原理的.

感谢吴锦伟同志对部分内容的有益讨论.

- [1] M. V. Berry, *Proc. Roy. Soc. Lond.*, **A392**(1984), 45.
- [2] A. Shapere and F. Wilczek, *Geometric Phases in Physics* (Advanced Series in Mathematical Physics, Vol. 9) (World Scientific, Singapore, 1989).
- [3] 丁尚武、叶朝辉, *物理学进展*, **12**(1992), 63.
- [4] H. P. Breuer *et al.*, *Phys. Rev.*, **A47**(1993), 725.
- [5] C. Z. Ning and H. Haken, *Mod. Phys. Lett.*, **B6**(1992), 1541.
- [6] J. H. Hannay, *J. Phys. A*, **18**(1985), 221.
- [7] P. D. S. Gerbert, *Ann. Phys.*, **189**(1989), 155.
- [8] J. Ihm, *Intern. J. Mod. Phys.*, **B7**(1993), 2109.
- [9] D. J. Moore, *Phys. Rep.*, **210**(1991), 1.
- [10] Y. Aharonov and J. Anandan, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 1593.
- [11] J. C. Solem and L. C. Biedenharn, *Found. Phys.*, **23**(1993), 185.
- [12] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3rd. Edition (McGraw-Hill Book Company, New York, 1968), p. 290.

CONDITIONS FOR THE EXISTENCE OF NON-ZERO GEOMETRIC PHASE AND ITS FORMULA

LI CHUN-FANG GUO GUANG-CAN

(*Department of Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026*)

(Received 7 February 1995; revised manuscript received 4 April 1995)

ABSTRACT

First we put forward an essential condition, for the existence of the non-zero adiabatic geometric phase of a quantum-mechanical Hamiltonian system, that the Hamiltonian operators at different times do not commute. Then it is shown that constraint $\langle n'(t) | \frac{d}{dt} | n'(t) \rangle = 0$ determines completely the phase relation of normalized eigenstate vectors $|n'(t)\rangle$ at different times. According to this property, we advance the sufficient and necessary condition for the existence of the non-zero adiabatic geometric phase, which is $|n'(T)\rangle \neq |n'(0)\rangle$ when $\langle n'(t) | \frac{d}{dt} | n'(t) \rangle = 0$. And also we derive a general time-integral formula for the adiabatic geometric phase along the line. Finally, as an application of it, we calculate the geometric phase of a spin 1/2 system once discussed by Solem and Biedenharn. It is pointed out that the problem encountered by them lies in the multi-valuedness of the eigenstate vector in parameter space.

PACC: 0365