

Born-Oppenheimer 近似下谐振子场驱动电磁模系统的 Berry 相和 Hannay 角*

刘昊迪[†]

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

(2012年11月19日收到; 2012年12月29日收到修改稿)

研究了 Born-Oppenheimer 近似下谐振子场驱动电磁模系统的 Berry 相和 Hannay 角, 通过理论计算得到了其表达式, 并讨论了这二者之间的半经典关系. 结果表明, 这一量子 Born-Oppenheimer 复合系统的 Berry 相包含两部分: 第一部分与通常几何相的定义相同, 另一项则是由耦合造成的有效规范势引入的. 这一量子修正可以被看作一个等效的 Aharonov-Bohm 效应. 不仅如此, 其对应经典系统的 Hannay 角的定义中也存在类似的现象. 由此可见, 这一复合系统的 Berry 相与 Hannay 角之间也存在半经典关系, 并与文献 [16] 中通常情况下的半经典关系相同. 此外, 上述理论也可以运用于解决产生中性原子的人造规范势等物理问题.

关键词: Berry 相, Hannay 角, 量子经典对应, Born-Oppenheimer 近似

PACS: 03.65.Vf, 03.65.Ca, 03.65.Sq

DOI: 10.7498/aps.62.100302

1 引言

众所周知, 量子态在绝热循环演化过程中会获得一个附加几何相位^[1]. 这一被称作 Berry 相的相位如今已经成为量子力学中的一个重要概念^[3-5], 并广泛应用于从凝聚态物理到化学等众多领域之中^[6-12]. 在 Berry 相位发现后不久, 又发现这一相位可以看作微分几何中一个 Hermitian 线丛中的 holonomy 效应^[13]. 不仅如此, Hannay 发现经典可积系统^[14]的角变量也会在系统于相空间绝热演化时获得一个附加的角度^[15]. 随后 Berry 证明了这一 Hannay 角与 Berry 相在半经典近似下存在一个天然的联系^[16]. 自然而然地, 这一量子-经典对应引发了许多令人印象深刻的工作^[17-21].

在 Berry 和 Hannay 的文章中, 绝热演化参数被看作与它们所驱动的系统无关. 然而实际上, 这些参数本身也是其他一些系统的动力学量并会受到被驱动系统的反作用. 这种驱动子系统要远比被驱动子系统“重”和“慢”的复合系统通常可以采用

Born-Oppenheimer (BO) 近似来处理 (这里我们称其为 BO 复合系统). BO 近似广泛应用于物理和化学等领域并成为其中的一个基本工具^[6,23]. 利用这一近似, 可以先将慢变量看作参数解决快子系统哈密顿量的本征问题, 然后将含有慢变量的本征值带入到慢系统中以此得到一个有效哈密顿量. 特别是如果快子系统存在一个 Berry 联络, 那么有效哈密顿量中会包含一个有效规范势^[22]. 这一效应对 BO 复合系统动力学的影响也在一些有趣的工作中被详细地进行了讨论^[24-29]. 然而对于 BO 复合系统中有效本征函数的绝热演化得到的 Berry 相却尚未得到研究. 并且在文献 [16] 中, Berry 相和 Hannay 角之间建立起一个半经典关系. 所以 BO 复合系统中的 Berry 相是否与其经典对应的 Hannay 角存在相同的关系也是一个值得探讨的问题. 这些都有待于进一步的研究, 并且会加深人们对 Berry 相及其与 Hannay 角之间关系的认识.

本文对 Born-Oppenheimer 近似下谐振子场驱动电磁模系统的 Berry 相和 Hannay 角进行了系统的研究. 理论推导表明子系统间相互作用带来的有

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2011CB921503) 和国家自然科学基金 (批准号: 11075020, 91021021, 11274051) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: liu_haodi@iapcm.ac.cn

效规范势会通过一个等效的 Aharonov-Bohm (AB) 效应诱导出一个等效联络, 从而影响整个系统的 Berry 相. 并且, 相应经典 BO 复合系统中的 Hannay 角的定义中也存在类似效应. 此外, Berry 相和 Hannay 角被证明可以通过一个微分表达式与 Berry 相联系起来, 这与文献 [16] 的结果是一致的. 这表明量子-经典对应在某些近似下仍然是起作用的.

2 量子谐振子驱动电磁模的 Berry 相

考虑一个谐振子势场驱动的电磁模, 其中谐振子的频率远小于电磁模的频率. 这一 BO 复合系统的哈密顿量可写为

$$H = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \hbar \mathbf{X}_1 \hat{Q} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) + \frac{1}{2} i \hbar Y_1 \hat{Q} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) + \frac{1}{2} [\mathbf{X}_2 \hat{Q}^2 + Y_2 (\hat{P} \hat{Q} + \hat{Q} \hat{P}) + Z_2 \hat{P}^2], \quad (1)$$

其中 $\mathbf{X}_1 = (X_1, Y_1)$ 和 $\mathbf{X}_2 = (X_2, Y_2, Z_2)$ 分别是两个子系统的缓变参数. 则快子系统的哈密顿量为

$$\hat{H}_1 = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \hbar \mathbf{X}_1 \hat{Q} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) + \frac{1}{2} i \hbar Y_1 \hat{Q} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}), \quad (2)$$

其中包含了快系统的自由哈密顿量和子系统间的耦合. 按照 BO 近似, 我们可以首先将 \hat{Q} 看作与 \mathbf{X}_1 类似的参数来求解 \hat{H}_1 的本征问题. 考虑到含质量参数 μ 的正则变换 $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\mu\hbar\omega}} (\mu\omega\hat{q} + i\hat{p})$,

$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\mu\hbar\omega}} (\mu\omega\hat{q} - i\hat{p})$ 其本征函数 $\psi_n(q; \mathbf{Q}, \mathbf{X}_1)$ 和本征值 $E_n(\mathbf{Q}, \mathbf{X}_1)$ 为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \frac{\mu(X_1^2 + Y_1^2)Q^2}{4\alpha^2},$$

$$\psi_n = \sqrt{\alpha} \chi_n \left(\alpha \left(q + \frac{X_1 Q}{\sqrt{2}\alpha\omega} \right) \right) \times \exp \left[\frac{-i\alpha Y_1 Q}{\sqrt{2}\omega} \right], \quad (3)$$

其中 $\alpha = \sqrt{\mu\omega/\hbar}$, $\chi_n(\xi)$ 为归一化的 Hermite 多项式. 然后将得到的能量本征值 E_n 作为一个附加势加入到 \hat{H}_2 之中, 于是慢子系统的有效哈密顿量可表示为

$$\hat{H}_n^{\text{eff}} = \frac{1}{2} \left\{ \mathbf{X}_2 Q^2 + Y_2 \left[(\hat{P}' - \hbar \mathbf{A}^{\text{eff}}) Q + Q (\hat{P}' - \hbar \mathbf{A}^{\text{eff}}) \right] + Z_2 (\hat{P}' - \hbar \mathbf{A}^{\text{eff}})^2 \right\} + E_n(\mathbf{Q}, \mathbf{X}_1), \quad (4)$$

其中

$$\mathbf{A}^{\text{eff}}(n; \mathbf{Q}, \mathbf{X}_1) \equiv i \int d\mathbf{q} \psi_n^*(\mathbf{q}; \mathbf{Q}, \mathbf{X}_1) \frac{\partial \psi_n(\mathbf{q}; \mathbf{Q}, \mathbf{X}_1)}{\partial \mathbf{Q}} = -\frac{X_1 Y_1 Q}{2\omega^2} \quad (5)$$

是由 Mead 提出的有效规范势 [22]. 由于 $\mathbf{A}^{\text{eff}}(n; \mathbf{Q}, \mathbf{X}_1)$ 不显含时间, 则由此会产生一个类似于分子系统 [22] 中的等效 Aharonov-Bohm 效应 [30]. 相应地, 如果对 \hat{H}_n^{eff} 的本征函数 φ_m^n 做如下的规范变换:

$$\varphi_m^n(\mathbf{Q}; \mathbf{X}) \rightarrow \tilde{\varphi}_m^n(\mathbf{Q}; \mathbf{X}) = e^{-i\Phi} \varphi_m^n(\mathbf{Q}; \mathbf{X}), \quad (6)$$

其中 $\Phi(n; \mathbf{Q}, \mathbf{X}_1) \equiv \int^{C(\mathbf{Q})} \mathbf{A}^{\text{eff}}(n; \mathbf{Q}, \mathbf{X}_1) \cdot d\mathbf{Q}$, 线积分可沿任意路径 $C(\mathbf{Q})$ 进行, 以及 $\mathbf{X} \equiv \mathbf{X}_1 \otimes \mathbf{X}_2$. 那么规范势 \mathbf{A}^{eff} 可以通过这一变换从哈密顿量 (4) 的表达式中消除. 因此变换后的本征函数 $\tilde{\varphi}_m^n(\mathbf{Q}; \mathbf{X})$ 满足

$$\left\{ \frac{1}{2} [\mathbf{X}_2 \hat{Q}^2 + Y_2 (\hat{P} \hat{Q} + \hat{Q} \hat{P}) + Z_2 \hat{P}^2] + E_n(\mathbf{Q}, \mathbf{X}_1) \right\} \tilde{\varphi}_m^n = E_{mn}^{\text{eff}}(\mathbf{X}) \tilde{\varphi}_m^n. \quad (7)$$

由此, 有效哈密顿量 (4) 的本征值和本征函数为

$$E_{mn}^{\text{eff}}(\mathbf{X}) = \left(m + \frac{1}{2} \right) \hbar\Omega + \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega,$$

$$\varphi_m(\mathbf{Q}; \mathbf{X}) = \tilde{\varphi}(\mathbf{Q}; \mathbf{X}) e^{i\Phi} = \sqrt{\alpha'} \chi_m(\alpha' Q) \times \exp \left[-i \left(\frac{Y_2}{2Z_2\hbar} + \frac{X_1 Y_1}{4\omega^2} \right) Q^2 \right], \quad (8)$$

其中 $\Omega = \left[\frac{(4\alpha^2 X_2 - \mu X_1^2 - \mu Y_1^2) Z_2}{4\alpha^2} - Y_2^2 \right]^{1/2}$, $\alpha' = \sqrt{\frac{\Omega}{Z_2 \hbar}}$. 通过以上处理, \hat{H}_n^{eff} 的本征值 $E_{mn}^{\text{eff}}(\mathbf{X})$ 可以本看作总哈密顿量 \hat{H} 的本征值, 而 \hat{H} 的本征函数可以定义为 φ_m^n 与快系统本征函数 ψ_n 的乘积:

$$\Psi_{mn}^{\text{tot}}(q; \mathbf{Q}, \mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2) \approx \varphi_m(\mathbf{Q}; \mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2) \psi_n(q; \mathbf{Q}, \mathbf{X}_1). \quad (9)$$

因此, 整个系统的 Berry 相可以直接通过计算得到 [2]

$$\gamma_{mn} = \oint \iint d\mathbf{q} d\mathbf{Q} \psi_n^*(\mathbf{q}; \mathbf{Q}, \mathbf{X}_1) \varphi_m^*(\mathbf{Q}; \mathbf{X}) \times d\mathbf{X} [\varphi_m(\mathbf{Q}; \mathbf{X}) \psi_n(q; \mathbf{Q}, \mathbf{X}_1)] = \oint \frac{(2m+1)Z_2}{4\Omega} \left[\frac{\mu Y_1^2}{2\alpha^2 \omega} d \left(\frac{X_1}{Y_1} \right) + d \left(\frac{Y_2}{Z_2} \right) \right], \quad (10)$$

其中注意到, 方程 (10) 的第二行第一项是由有效规范势引入的 (5), 而这一有效规范势又是由慢变量 Q 和快变量之间的相互作用带来的. 因此这一项可以看作一个等效 AB 效应的结果, 这是与通常量子系统中的几何相所不同的.

3 经典 Hannay 角

由量子经典对应理论, Hannay 角是量子 Berry 相的经典类比 [16,29]. 于是, 考虑上述 Berry 相的经典对应也是十分有趣的. 哈密顿量 (1) 的经典版本可写为

$$H = H_1(\mathbf{X}_1) + H_2(\mathbf{X}_2), \quad (11)$$

其中 $\mathbf{X}_1 = (X_1, Y_1, \dots)$ 为快子系统的含时演化参数, 其哈密顿量为

$$H_1 = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{\mu Y_1 p Q}{\sqrt{2\alpha}} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 \left(q + \frac{X_1 Q}{\sqrt{2\alpha\omega}} \right)^2 - \frac{\mu(X_1^2 + Y_1^2)Q^2}{4\alpha^2},$$

而 $H_2 = \frac{1}{2}(X_2 Q^2 + 2Y_2 P Q + Z_2 P^2)$ 则描述被含时参数 $\mathbf{X}_2 = (X_2, Y_2, \dots)$ 驱动的慢子系统. 与量子 BO 复合系统的处理相类似, 将 Q 看作快子系统参数做正则变换 $(q, p) \rightarrow (\theta, I)$

$$q = \sqrt{\frac{2I}{\mu\omega}} \cos\theta - \frac{X_1 Q}{\sqrt{2\alpha\omega}},$$

$$p = -\sqrt{2I\mu\omega} \sin\theta - \frac{\mu Y_1 Q}{\sqrt{2\alpha}}. \quad (12)$$

并对所有 θ 求平均 [29], 然后将 P 变换为 $P' = P + A^{\text{eff}}(I; Q, X_1)$ [28], 慢系统的有效哈密顿量可写为

$$H^{\text{eff}} = \frac{1}{2}[X_2 Q^2 + 2Y_2(P' - A^{\text{eff}})Q + Z_2(P' - A^{\text{eff}})^2] + I\omega - \frac{\mu(X_1^2 + Y_1^2)Q^2}{4\alpha^2} + \frac{A_1}{dt}, \quad (13)$$

其中 $A_1 = \frac{\mu Y_1 Q^2}{2\alpha^2 \omega} dX_1$ 是由含时正则变换引入的一形式联络 [16]. 函数 $A^{\text{eff}}(I; Q, X_1) \equiv \left\langle \sum_i p_i \frac{\partial q_i}{\partial X_1} \right\rangle_{\theta} = \frac{\mu X_1 Y_1 Q}{2\alpha^2 \omega}$ 则可看作一个有效势. 由于作用量 I 是不变量, 可以看作常数, 则有效哈密顿量 (13) 当中只含有慢子系统的变量. 通过正则变换 $(Q, P) \rightarrow (\phi, J)$:

$$Q = \left(\frac{2Z_2 J}{\Omega} \right)^{1/2} \cos\phi,$$

$$P = - \left(\frac{2Z_2 J}{\Omega} \right)^{1/2} \left(\frac{Y_2}{Z_2} \cos\phi + \frac{\Omega}{Z_2} \sin\phi \right) + A^{\text{eff}}, \quad (14)$$

并将方程 (14) 代入方程 (13) 同时对 ϕ 取平均, 整个系统的哈密顿量变为

$$\langle H_{\text{av}} \rangle = I\omega + J\Omega + \frac{\langle A_1 \rangle_{\phi} + A_2}{dt}, \quad (15)$$

其中

$$\langle A_1 \rangle_{\phi} = \frac{\mu Y_1 Z_2 J}{2\alpha^2 \omega \Omega} dX_1,$$

$$A_2 = \left[-\frac{Y_2 J}{2Z_2} + \frac{\mu X_1 Y_1 J}{2\alpha^2 \omega} \right] d\left(\frac{Z_2}{\Omega} \right). \quad (16)$$

分别是快、慢子系统的经典一形式联络, $\langle \dots \rangle_{\phi}$ 表示对 ϕ 求平均. 将 A_2 与角度一形式的通常定义 [16] 相对比可以看出, 有效矢势 A^{eff} 中为其带来了一个附加项 $\frac{\mu X_1 Y_1 J}{2\alpha^2 \omega} d\left(\frac{Z_2}{\Omega} \right)$. 由此可得整个系统的 Hannay 角为

$$\Delta\theta = 0,$$

$$\Delta\phi = - \oint \frac{Z_2}{2\Omega} \left[d\left(\frac{Y_2}{Z_2} \right) + \frac{\mu Y_1^2}{4\alpha^2 \omega} d\left(\frac{X_1}{Y_1} \right) \right]. \quad (17)$$

与方程 (10) 相比可得, 量子 BO 复合系统的 Berry 相和经典 BO 复合系统的 Hannay 角之间的关系式为

$$\Delta\theta = -\partial\gamma_{mn}/\partial n,$$

$$\Delta\phi = -\partial\gamma_{mn}/\partial m, \quad (18)$$

这与文献 [16] 中的结果相符合, 由此可见这一对 BO 复合系统中的 Berry 相和 Hannay 角具有与一般系统中相同的半经典关系. 并且方程 (17) 中由 A^{eff} 带来的 $\Delta\phi$ 的第二项与 A^{eff} 对方程 (10) 的贡献也满足这一关系.

4 总结

本文分别研究了量子 and 经典 BO 复合系统中的 Berry 相和 Hannay 角. 所得的 Berry 相由两部分定义: 慢一形式联络和快一形式在慢子系统中的平均值. 有趣的是, 与没有 BO 近似的系统相比, Berry 相被快慢变量间相互作用引起的有效规范势所修正, 这一修正可以看作一个等效的 AB 效应. 因此这一机制也可以用来产生中性原子的人造规范势 [31], 这一应用我们将在另一篇文章中讨论. 进一步, 在这一 Berry 相的经典对应 Hannay 角中也发现了相类似的效应. 利用半经典理论, 我们证明了

这个 Hannay 角在半经典情况下与 Berry 相存在一个微分关系式, 并与一般系统中 Berry 相和 Hannay

角满足的关系式相同^[16]. 这说明量子经典对应特定近似下仍然是存在的.

- [1] Born M, Oppenheimer J 1927 *Ann. Phys.* **84** 457
 [2] Berry M V 1984 *Proc. R. Soc. A* **392** 45
 [3] Chruściński D, Jamiołkowski A 2004 *Geometric Phases in Classical and Quantum Mechanics* (Berlin: Birkhäuser)
 [4] Berry M V 1990 edited by Bregda U, Garmo G, Morandi G *Anomalies, Phases, Defects* (Naples: Bibliopolis)
 [5] Robbins J M 1997 arXiv1008.5331.
 [6] Bohm A, Mostafazadeh A, Koizumi H, Niu N, Zwanziger J 2003 *The Geometric Phase in Quantum Systems* (Berlin: Springer-Verlag)
 [7] Xiao D, Zhang M C, Niu Q 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 1959
 [8] Wang L C, Yan J Y, Yi X X 2010 *Chin. Phys. B* **19** 040512
 [9] Jia X Y, Li W D, Liang J Q 2007 *Chin. Phys.* **16** 2855
 [10] Wu J W, Guo G C 1995 *Chin. Phys.* **4** 406
 [11] Liu H D, Yi X X 2011 *Phys. Rev. A* **84** 022114
 [12] Shan C J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 220302 (in Chinese) [单传家 2012 物理学报 **61** 220302]
 [13] Simon B 1983 *Phys. Rev. Lett.* **51** 2167
 [14] Arnold V I 1978 *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (Berlin: Springer-Verlag)
 [15] Hannay J H 1985 *J. Phys. A* **18** 221
 [16] Berry M V 1985 *J. Phys. A* **18** 15
 [17] Giavarini G, Gozzi E, Rohrllich D, Thacker W D 1989 *Phys. Rev. D* **39** 3007
 [18] Jarzynski C 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 1264
 [19] Pati A K 1998 *Ann. Phys.* **270** 178
 [20] Liu J, Hu B, Li B W 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 1749
 [21] Fu L B, Liu J 2010 *Ann. Phys.* **325** 2425
 [22] Mead C A, Truhlar D 1979 *J. Chem. Phys.* **70** 2284
 [23] Mead C A 1992 *Rev. Mod. Phys.* **64** 51
 [24] Stone M 1986 *Phys. Rev. D* **33** 1191
 [25] Berry M V, Robbins J M 1993 *Proc. R. Soc. A* **442** 659
 [26] Gozzi E, Thacker W D 1987 *Phys. Rev. D* **35** 2398
 [27] Sun C P, Ge M L 1990 *Phys. Rev. D* **41** 1349
 [28] Zhang Q, Wu B 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 190401
 [29] Liu H D, Wu S L, Yi X X 2011 *Phys. Rev. A* **83** 062101
 [30] Aharonov Y, Bohm D 1959 *Phys. Rev.* **115** 485
 [31] Dalibard J, Gerbier F, Juzeliūnas G, Öhberg P 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1523

Berry phase and Hannay's angle of an electromagnetic mode system driven by harmonic field with Born-Oppenheimer approximation*

Liu Hao-Di[†]

(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

(Received 19 November 2012; revised manuscript received 29 December 2012)

Abstract

In this paper, we investigate the Berry phase and Hannay's angle of an electromagnetic mode system driven by harmonic field with Born-Oppenheimer approximation and obtain their algebraic expressions by theoretical calculation. The semiclassical relation between Berry phase and Hannay's angle is discussed. We find that besides the usual connection term, the Berry phase of BO hybrid system contains a novel term brought forth by the coupling induced effective gauge potential. This quantum modification can be viewed as an effective Aharonov-Bohm effect. Moreover, a similar phenomenon is founded in the Hannay's angle of classical BO hybrid system, which indicates that the Berry phase and Hannay's angle possess the same relation as the usual one. Besides, our theory can also be used to generate Artificial gauge potentials for neutral atoms.

Keywords: Berry phase, Hannay's angle, quantum-classical correspondence, Born-Oppenheimer approximation

PACS: 03.65.Vf, 03.65.Ca, 03.65.Sq

DOI: 10.7498/aps.62.100302

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB921503), and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11075020, 91021021, 11274051).

† Corresponding author. E-mail: liu_haodi@iapcm.ac.cn