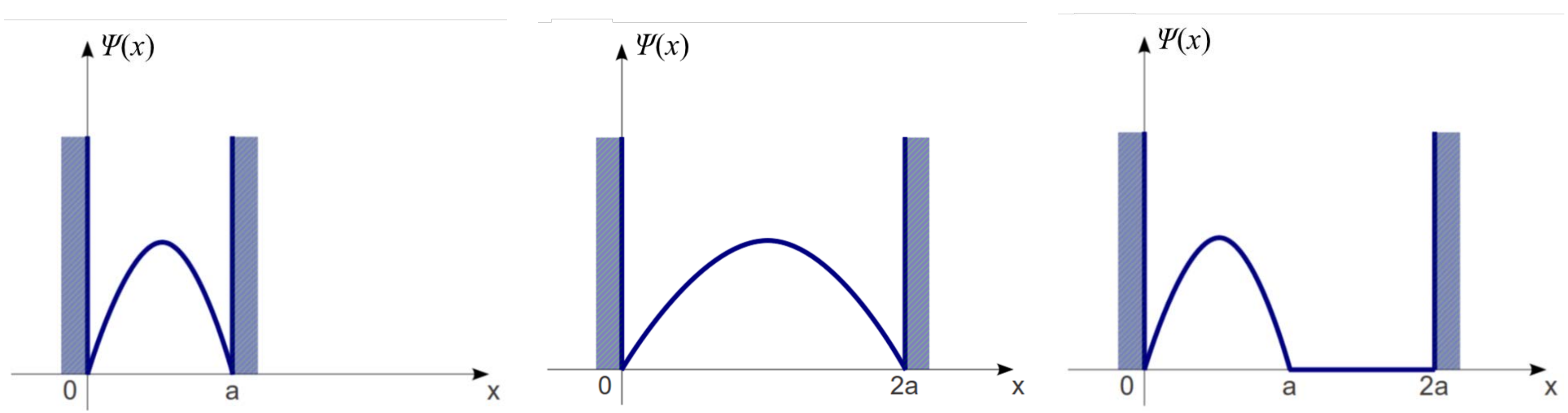
第十章 绝热近似和Berry相位

10.1 绝热定理

- **绝热定理**：假定系统的Hamiltonian随时间缓慢变化，如果在初始时刻 t_0，系统处在 $\hat{H}(t_0)$ 的第 n 个瞬时本征态 $|n(t_0)\rangle$，那么在此后任意时刻 t，系统会保持在 $\hat{H}(t)$ 的第 n 个瞬时本征态 $|n(t)\rangle$。

❖ 本征能量没有简并，并且存在能隙

一个例子



$\psi^i(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$

初态

$\psi^f(x) = \sqrt{\frac{1}{a}}\sin\left(\frac{\pi}{2a}x\right)$

势井缓慢变宽

$\psi^f(x) = \psi^i(x)$

势井突然变宽

10.1 绝热定理

绝热近似

- 含时Hamiltonian的能量本征值和本征态都是含时的

$$\hat{H}(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle$$

- 在任意时刻，瞬时能量本征态都构成一组正交完备基

$$\langle m(t)|n(t)\rangle = \delta_{mn}, \qquad \sum_n |n(t)\rangle\langle n(t)| = 1$$

- 在时刻 t，任意态都可以展开成如下形式，

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n(t)\rangle$$

- 根据Schrödinger方程，有

$$i\hbar\sum_n\left[\left(\frac{\partial}{\partial t}c_n(t)\right)|n(t)\rangle + c_n(t)\left(\frac{\partial}{\partial t}|n(t)\rangle\right)\right] = \sum_n c_n(t)\hat{H}(t)|n(t)\rangle$$

- 方程左右两边分别与 $|m(t)\rangle$ 做内积，有

$$\frac{\partial}{\partial t}c_m(t) = -\sum_n c_n(t)\langle m(t)|\frac{\partial}{\partial t}|n(t)\rangle - \frac{i}{\hbar}E_m(t)c_m(t)$$

10.1 绝热定理

- 下面我们求近似解。我们对 $\hat{H}(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle$ 两边对时间 t 求导，然后再分别与 $|m(t)\rangle$ 做内积，有

$$\langle m(t)|\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{H}(t)\right)|n(t)\rangle + \langle m(t)|\hat{H}(t)\left(\frac{\partial}{\partial t}|n(t)\rangle\right)$$
$$= \frac{\partial}{\partial t}E_m(t)\delta_{mn} + E_n(t)\langle m(t)|\frac{\partial}{\partial t}|n(t)\rangle.$$

- 因为 $\hat{H}(t)$ 是Hermitian算符，所以

$$\langle m(t)|\hat{H}(t)\left(\tfrac{\partial}{\partial t}|n(t)\rangle\right) = E_m(t)\langle m(t)|\left(\tfrac{\partial}{\partial t}|n(t)\rangle\right)$$

因此，对于 $m \neq n$，我们有

$$\langle m(t)|\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{H}(t)\right)|n(t)\rangle = \left(E_n(t) - E_m(t)\right)\langle m(t)|\frac{\partial}{\partial t}|n(t)\rangle$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}c_m(t) = -\sum_n c_n(t)\langle m(t)|\frac{\partial}{\partial t}|n(t)\rangle - \frac{i}{\hbar}E_m(t)c_m(t)}$$

- 于是，我们有

$$\frac{\partial}{\partial t}c_m(t) = -c_m(t)\langle m(t)|\frac{\partial}{\partial t}|m(t)\rangle$$
$$-\sum_{n\neq m} c_n(t)\frac{\langle m(t)|\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{H}(t)\right)|n(t)\rangle}{E_n(t) - E_m(t)} - \frac{i}{\hbar}E_m(t)c_m(t)$$

10.1 绝热定理

$$\frac{\partial}{\partial t}c_m(t) = -c_m(t)\langle m(t)|\frac{\partial}{\partial t}|m(t)\rangle - \sum_{n\neq m} c_n(t)\frac{\langle m(t)|\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{H}(t)\right)|n(t)\rangle}{E_n(t)-E_m(t)} - \frac{i}{\hbar}E_m(t)c_m(t)$$

➢ 如果 $\hat{H}(t)$ 随时间缓慢变化，并且能级没有简并，那么我们可以忽略等式右边第二项，

$$\frac{\partial}{\partial t}c_m(t) = -c_m(t)\langle m(t)|\frac{\partial}{\partial t}|m(t)\rangle - \frac{i}{\hbar}E_m(t)c_m(t)$$

这就是绝热近似下的结果。

➢ 将初始时刻取为 $t = 0$，可以解得

$$c_m(t) = c_m(0)e^{i\theta_m(t)}e^{i\gamma_m(t)}$$

其中，
$$\theta_m(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt' \qquad \text{动力学相位}$$

$$\gamma_m(t) = i\int_0^t \langle m(t')|\frac{\partial}{\partial t'}|m(t')\rangle dt' \qquad \text{几何相位}$$

❖ $\gamma_m(t)$ 是实数。

10.2 Berry相位

- 考虑Hamiltonian的时间演化是由一些参数的时间演化引起的，即Hamiltonian依赖于参数 $\mathbf{R}(t) = (R_1(t), R_2(t), \cdots)$，则几何相位可以写为

$$\gamma_n = i\int_0^t \langle n(t')|\frac{\partial}{\partial t'}|n(t')\rangle dt' = i\int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_f} \langle n(\mathbf{R})|\nabla_R|n(\mathbf{R})\rangle \cdot d\mathbf{R}$$

其中 $\mathbf{R}_i$ 是初始时刻的参数，$\mathbf{R}_f$ 是终点时刻的参数。

- 我们可以定义被积函数为

$$\mathbf{A}_n = i\langle n(\mathbf{R})|\nabla_R|n(\mathbf{R})\rangle$$

则几何相位可以写为

$$\gamma_n = \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_f} \mathbf{A}_n \cdot d\mathbf{R}$$

- $\mathbf{A}_n$不是一个规范不变量。在规范变换 $|n'(\mathbf{R})\rangle = e^{i\chi(\mathbf{R})}|n(\mathbf{R})\rangle$下，$\mathbf{A}_n$的变换为

$$\mathbf{A}_n \to \mathbf{A}'_n = i\langle n(\mathbf{R})|e^{-i\chi(\mathbf{R})}\nabla_R\left(e^{i\chi(\mathbf{R})}|n(\mathbf{R})\rangle\right) = \mathbf{A}_n - \nabla_R\chi(\mathbf{R})$$

10.2 Berry相位

- γ_n 并不能简单的写成 **R** 的函数形式，而是与积分路径有关

$$\boxed{\gamma_n = \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_f} \mathbf{A}_n \cdot d\mathbf{R}}$$

- 如果选择一个闭合路径，那么就可以消除由于选取规范而带来的影响，从而得到一个规范不变量。
- 考虑系统在参数空间沿一个闭合回路 C 的演化

$$\gamma_n(C) = \oint_C \mathbf{A}_n \cdot d\mathbf{R}$$

$\gamma_n(C)$ 称为Berry相位，$\mathbf{A}_n$ 称为Berry 联络。

- 利用Stokes定理，可以将线积分变换成面积分

$$\gamma_n(C) = -\mathrm{Im}\iint_C (\nabla \times \langle n|\nabla n\rangle)\cdot d\mathbf{S} = -\mathrm{Im}\iint_C (\langle \nabla n| \times |\nabla n\rangle)\cdot d\mathbf{S}$$
$$= -\mathrm{Im}\iint_C (\sum_{m\neq n}\langle \nabla n|m\rangle \times \langle m|\nabla n\rangle)\cdot d\mathbf{S}$$

10.2 Berry相位

- γ_n 可以表示为

$$\gamma_n(C) = -\iint_C \mathbf{V}_n \cdot d\mathbf{S}$$

其中，$\mathbf{V}_n = \mathrm{Im}\sum_{m\neq n}\langle\nabla n|m\rangle \times \langle m|\nabla n\rangle$ 称为Berry曲率。

- 对方程 $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ 两边求微分，有

$$(\nabla\hat{H})|n\rangle + \hat{H}|\nabla n\rangle = (\nabla E_n)|n\rangle + E_n|\nabla n\rangle$$

因此，

$$\langle m|\nabla n\rangle = \frac{\langle m|(\nabla\hat{H})|n\rangle}{E_n - E_m}, \quad m\neq n$$

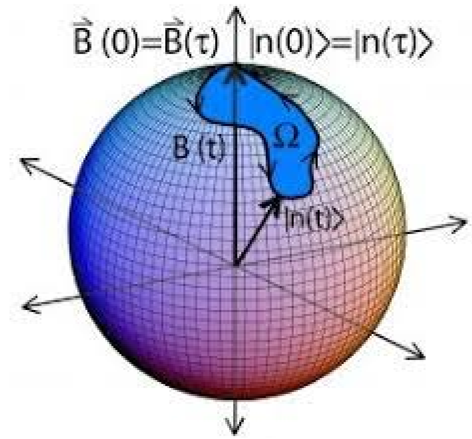
所以我们有

$$\mathbf{V}_n = \mathrm{Im}\sum_{m\neq n}\frac{\langle n|\nabla\hat{H}|m\rangle \times \langle m|\nabla\hat{H}|n\rangle}{(E_n - E_m)^2}$$

- 对态矢量 $|n\rangle$ 的求导转换成了对Hamiltonian的求导，因此这个表达式与计算 $|n\rangle$ 时的随机相位无关。

10.2 Berry相位

磁场中的自旋



- 在静磁场中自旋的Hamiltonian为

$$\hat{H} = -\frac{2\mu_B}{\hbar}\mathbf{B}\cdot\hat{\mathbf{s}}$$

能量本征值为

$$E_n(B) = -2\mu_B Bn, \qquad n = -s, -s+1, \cdots, s-1, s$$

- 考虑磁场保持强度不变沿一个闭合回路 C 缓慢变化一周。参数是磁场的方向，即两个方位角 θ 和 φ。Berry曲率为

$$\mathbf{V}_n = \frac{1}{\hbar^2 B^2}\mathrm{Im}\sum_{m\neq n}\frac{\langle n|\hat{\mathbf{s}}|m\rangle \times \langle m|\hat{\mathbf{s}}|n\rangle}{(m-n)^2}$$

- 我们选择任意时刻的瞬时 z 轴平行于磁场 $\mathbf{B}$，于是我们有

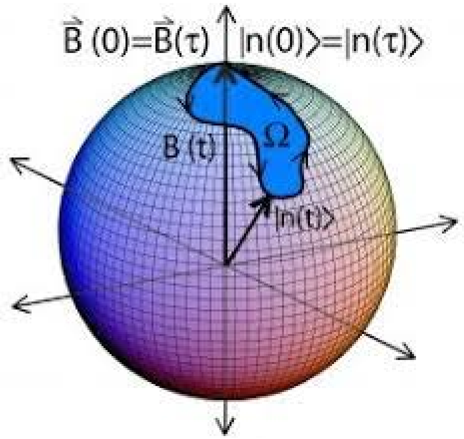
$$\begin{aligned}\langle n|\hat{\mathbf{s}}|m\rangle \times \langle m|\hat{\mathbf{s}}|n\rangle &= \langle n|(\hat{s}_x\mathbf{e}_x + \hat{s}_y\mathbf{e}_y)|m\rangle \times \langle m|(\hat{s}_x\mathbf{e}_x + \hat{s}_y\mathbf{e}_y)|n\rangle \\ &= (\langle n|\hat{s}_x|m\rangle\langle m|\hat{s}_y|n\rangle - \langle n|\hat{s}_y|m\rangle\langle m|\hat{s}_x|n\rangle)\mathbf{e}_z.\end{aligned}$$

10.2 Berry相位

- 再利用 $\hat{s}_x = \frac{1}{2}(\hat{s}_+ + \hat{s}_-)$和 $\hat{s}_y = \frac{1}{2i}(\hat{s}_+ - \hat{s}_-)$，我们有

$$\sum_{m\neq n}\frac{\langle n|\hat{\mathbf{s}}|m\rangle\times\langle m|\hat{\mathbf{s}}|n\rangle}{(m-n)^2}=\frac{i\hbar^2}{2}(\langle n|\hat{s}_+|n-1\rangle\langle n-1|\hat{s}_-|n\rangle-\langle n|\hat{s}_-|n+1\rangle\langle n+1|\hat{s}_+|n\rangle)\mathbf{e}_z$$

$$=in\hbar^2\mathbf{e}_z=in\hbar^2\frac{\mathbf{B}}{B}.$$



- 于是，我们有

$$\mathbf{V}_n = n\frac{\mathbf{B}}{B^3}$$

这相当于一个位于原点的有效单极子的场。

- 因此，Berry相位相当于单极子场在回路 C 所包围的球面上产生的通量，即

$$\gamma_n(C)=-\iint_C \mathbf{V}_n\cdot d\mathbf{S}=-\iint_C n\frac{\mathbf{B}}{B^3}\cdot d\mathbf{S}=-\iint_C n\frac{B}{B^3}B^2\sin\theta d\theta d\varphi=-n\Omega(C)$$

其中 $\Omega(C)$ 是回路 C 所围面积相对于原点（即 $B=0$）所对应的立体角。