

量子力學

第八章：绝热近似与 Berry 相因子

杨焕雄

中国科学技术大学物理学院近代物理系

hyang@ustc.edu.cn

December 27, 2018

本章动机:

量子力学体系的 Schrödinger 方程,

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

当 \hat{H} 不依赖于时间 t 时具有通解:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \Psi(0) \rangle \exp(-iE_n t / \hbar)$$

式中出现的 E_n 与 $|n\rangle$ 分别是 \hat{H} 的本征值以及相应的归一化本征矢量, $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$, $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$.

- 如果初始时刻体系处在 \hat{H} 的某个本征态上,

$$|\Psi(0)\rangle = |m\rangle$$

则在以后的任一时刻, 体系仍然确定地处在 \hat{H} 的这个本征态上, 差别只是多了一个不改变概率分布的含时相因子:

$$|\Psi(t)\rangle = |m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t}, \quad (t \geq 0)$$

绝热过程:

所以, 在体系的 Hamilton 算符不依赖于时间的情形下, 体系能量本征态随时间的演化是绝热过程.

① 绝热过程:

假设体系的哈密顿算符在某个物理过程中从初值 $\hat{H}(t_i)$ 逐渐变化到终值 $\hat{H}(t_f)$. 倘若此过程是绝热过程、且体系在初始时刻 t_i 处于哈密顿算符 $\hat{H}(t_i)$ 的本征态 $|n(t_i)\rangle$,

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

则体系在演化过程中的任一时刻 t 均处在瞬时哈密顿算符 $\hat{H}(t)$ 的本征态 $|n(t)\rangle$,

$$\hat{H}(t) |n(t)\rangle = E_n(t) |n(t)\rangle, \quad (t_i \leq t \leq t_f)$$

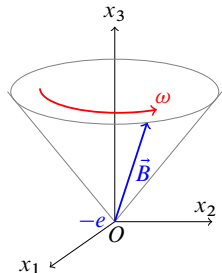
含时的 Hamilton 算符举例：

请问：

- ① 若 \hat{H} 依赖于时间参数, $\hat{H} = \hat{H}(t)$, 其本征态矢是否可以进行绝热演化?

考虑具有如下性质的旋转磁场. 磁场的方向与 x_3 轴夹角为 θ , 且以常角速度 ω 绕 x_3 轴转动:

$$\vec{B}(t) = \mathcal{B} \left[\vec{e}_3 \cos \theta + \vec{e}_1 \sin \theta \cos(\omega t) + \vec{e}_2 \sin \theta \sin(\omega t) \right]$$



此处约定 \mathcal{B} 为一正常数. 倘若让电子静止于此磁场的坐标原点, 则电子的 Hamilton 算符可表为:

$$\hat{H}(t) = -\vec{\mu}_S \cdot \vec{B}(t) = \frac{e\hbar\mathcal{B}}{2\mu} \left[\cos \theta \sigma_3 + \sin \theta \cos(\omega t) \sigma_1 + \sin \theta \sin(\omega t) \sigma_2 \right]$$

在 \hat{H} 随时间变化的情形下,

- ① \hat{H} 的本征值方程仍然存在:

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

但能量本征值 $E_n(t)$ 与属于它的本征态矢量 $|\psi_n(t)\rangle$ 均随时间变化. 体系的能量不是守恒量.

- ② \hat{H} 仍然是厄米算符. 因此, 在任一瞬间 t , $\hat{H}(t)$ 本征态矢的全体仍然构成 Hilbert 空间的一组正交归一的基底:

$$\langle \psi_n(t) | \psi_m(t) \rangle = \delta_{nm}, \quad \sum_n |\psi_n(t)\rangle \langle \psi_n(t)| = 1$$

因此, 含时薛定谔方程

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

的通解可以写作 $\{|\psi_n(t)\rangle\}$ 的线性叠加:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n \tilde{c}_n(t) |\psi_n(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\psi_n(t)\rangle \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\tau) d\tau \right]$$

现在讨论叠加系数 $c_n(t)$ 服从的方程：

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle &= i\hbar \sum_n [\dot{c}_n(t) |\psi_n(t)\rangle + c_n(t) |\dot{\psi}_n(t)\rangle] \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\tau) d\tau \right] \\
 &\quad + \sum_n c_n(t) E_n(t) |\psi_n(t)\rangle \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\tau) d\tau \right] \\
 &= i\hbar \sum_n [\dot{c}_n(t) |\psi_n(t)\rangle + c_n(t) |\dot{\psi}_n(t)\rangle] \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\tau) d\tau \right] \\
 &\quad + \sum_n c_n(t) \hat{H}(t) |\psi_n(t)\rangle \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\tau) d\tau \right] \\
 &= \hat{H}(t) |\Psi(t)\rangle \\
 &\quad + i\hbar \sum_n [\dot{c}_n(t) |\psi_n(t)\rangle + c_n(t) |\dot{\psi}_n(t)\rangle] \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\tau) d\tau \right]
 \end{aligned}$$

把此式与含时薛定谔方程比较，可知：

$$0 = i\hbar \sum_n [\dot{c}_n(t) |\psi_n(t)\rangle + c_n(t) |\dot{\psi}_n(t)\rangle] \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\tau) d\tau \right]$$

所以：

$$\dot{c}_m(t) = - \sum_n c_n(t) \langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\tau) d\tau + \frac{i}{\hbar} \int_0^t E_m(\tau) d\tau \right]$$

显然，欲求解此方程需事先计算 $\langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle$ 。

为此，我们求 $\hat{H}(t)$ 本征值方程

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

的时间导数：

$$\dot{\hat{H}}(t) |\psi_n(t)\rangle + \hat{H}(t) |\dot{\psi}_n(t)\rangle = \dot{E}_n(t) |\psi_n(t)\rangle + E_n(t) |\dot{\psi}_n(t)\rangle$$

再求上式与 $|\psi_m(t)\rangle$ 的标积，知：

$$\langle \psi_m(t) | \dot{\hat{H}}(t) | \psi_n(t) \rangle + E_m(t) \langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle = \dot{E}_n(t) \delta_{mn} + E_n(t) \langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle$$

上式在 $m \neq n$ 时给出：

$$\langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle = \frac{\langle \psi_m(t) | \dot{\hat{H}}(t) | \psi_n(t) \rangle}{E_n(t) - E_m(t)}, \quad (m \neq n)$$

所以， $c_m(t)$ 服从的微分方程表达为：

$$\begin{aligned} \dot{c}_m(t) = & -c_m(t) \langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_m(t) \rangle \\ & - \sum_{n \neq m} c_n(t) \frac{\langle \psi_m(t) | \dot{\hat{H}}(t) | \psi_n(t) \rangle}{E_n(t) - E_m(t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t [E_n(\tau) - E_m(\tau)] d\tau} \end{aligned}$$

到此为止， $c_m(t)$ 满足的方程是精确的。

绝热近似：

$$\left\| \frac{\hbar}{E_n(t) - E_m(t)} \frac{\langle \psi_m(t) | \dot{\hat{H}}(t) | \psi_n(t) \rangle}{\langle \psi_m(t) | \dot{\hat{H}}(t) | \psi_n(t) \rangle} \right\| \ll 1$$

请思考：为何称此不等式为绝热近似条件？

若上述不等式成立，则有：

$$\dot{c}_m(t) \approx -c_m(t) \langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_m(t) \rangle$$

其解为：

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

其中出现的

$$\gamma_m(t) = i \int_0^t d\tau \langle \psi_m(\tau) | \dot{\psi}_m(\tau) \rangle$$

为实参数 (Why?). 所以，绝热近似下含时薛定谔方程的通解可写为：

$$|\Psi(t)\rangle \approx \sum_m c_m(0) |\psi_m(t)\rangle \exp \left[i\gamma_m(t) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t E_m(\tau) d\tau \right]$$

假设 $c_m(0) = \delta_{mn}$ ，即假设体系在初始时刻处在 $\hat{H}(0)$ 的第 n 个本征态： $|\Psi(0)\rangle = |\psi_n(0)\rangle$ ，则在以后的任一时刻 $t > 0$ ，它亦将处在 $\hat{H}(t)$ 的第 n 个本征态：

$$|\Psi(t)\rangle \approx |\psi_n(t)\rangle \exp \left[i\gamma_n(t) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\tau) d\tau \right], \quad (\text{adiabatic !})$$

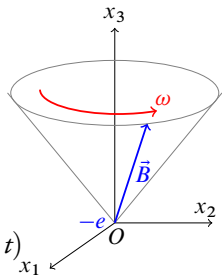
旋转磁场中电子的自旋态：

静止于旋转磁场原点处的电子的哈密顿算符可表为：

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 [\vec{\sigma} \cdot \vec{n}(t)]$$

式中， $\omega_0 = e\mathcal{B}/\mu$ ，且：

$$\vec{n}(t) = \vec{e}_3 \cos \theta + \vec{e}_1 \sin \theta \cos(\omega t) + \vec{e}_2 \sin \theta \sin(\omega t)$$



因为 $[\vec{\sigma} \cdot \vec{n}(t)]^2 = 1$ ，此体系 $\hat{H}(t)$ 的本征值谱为：

$$E_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \hbar \omega_0$$

这两个能量本征值均不依赖于时间。绝热近似条件在此例中表达为： $\omega \ll \omega_0$ 。

采取泡利表象，可把 $\hat{H}(t)$ 表达为如下厄米矩阵：

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\omega t} \\ \sin\theta e^{i\omega t} & -\cos\theta \end{bmatrix}$$

如此， $\hat{H}(t)$ 属于本征值 E_{\pm} 的正交归一的本征矢量分别是：

$$|\psi_+(t)\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2)e^{i\omega t} \end{bmatrix}$$

与

$$|\psi_-(t)\rangle = \begin{bmatrix} \sin(\theta/2)e^{-i\omega t} \\ -\cos(\theta/2) \end{bmatrix}$$

它们分别表示沿着 $\vec{B}(t)$ 的瞬时方向上的电子自旋向上态和自旋向下态。此例情形下的含时薛定谔方程可以精确求解。若假设在初始时刻电子沿 $\vec{B}(0)$ 方向处于自旋向上的状态：

$$|\Psi(0)\rangle = |\psi_+(0)\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix}$$

则含时薛定谔方程的精确解是：

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle = & \left[\cos(\Omega t/2) - i \frac{(\omega_0 - \omega \cos \theta)}{\Omega} \sin(\Omega t/2) \right] e^{-i\omega t/2} |\psi_+(t)\rangle \\ & + i \left[\frac{\omega}{\Omega} \sin \theta \sin(\Omega t/2) \right] e^{i\omega t/2} |\psi_-(t)\rangle \end{aligned}$$

式中，

$$\Omega = \sqrt{\omega^2 + \omega_0^2 - 2\omega\omega_0 \cos \theta}$$

显然，在 $t > 0$ 时刻，电子沿 $\vec{B}(t)$ 方向向自旋向下态的跃迁概率为：

$$\left\| \langle \psi_-(t) | \Psi(t) \rangle \right\|^2 = \left[\frac{\omega}{\Omega} \sin \theta \sin(\Omega t/2) \right]^2 \neq 0$$

所以，

- 电子自旋在进动磁场中的演化一般情形下不是绝热过程。

- 由于 $\Omega = \sqrt{\omega^2 + \omega_0^2 - 2\omega\omega_0 \cos \theta}$, 如果 $\omega \gg \omega_0$, 我们看到 $\Omega \approx \omega$, 电子将在自旋向上态和自旋向下态间来回振荡:

$$|\Psi(t)\rangle \approx [\cos(\omega t/2) + i \sin(\omega t/2)] e^{-i\omega t/2} |\psi_+(t)\rangle + i \sin \theta \sin(\omega t/2) e^{i\omega t/2} |\psi_-(t)\rangle$$

- 如果绝热近似条件成立, $\omega \ll \omega_0$, 我们有 $\Omega \approx \omega_0$, 且:

$$\left\| \langle \psi_-(t) | \Psi(t) \rangle \right\|^2 \approx \left[\frac{\omega}{\omega_0} \sin \theta \sin(\omega_0 t/2) \right]^2 \rightsquigarrow 0$$

电子近似地处在沿 $\vec{B}(t)$ 的方向自旋向上的状态. 此乃绝热演化过程. 从几何上理解: 绝热近似条件 $\omega \ll \omega_0$ 意味着与态矢量的相位变化相比, 磁场的转动非常缓慢.

作业:

格里菲斯《量子力学概论》:

Page243: 10.1; Page247: 10.2

Berry 相因子:

让我们对绝热近似下电子自旋态在进动磁场中的演化分析稍稍严格些。假设绝热近似条件成立： $\omega \ll \omega_0$ 。精确到无量纲小参数 ω/ω_0 的线性项，

$$\Omega \approx \omega_0 - \omega \cos \theta$$

仍按前面讨论假设电子在初始时刻处在自旋向上的能量本征态 $|\psi_+(0)\rangle$ 。如此，在其绝热演化过程中的任一时刻 $t > 0$ ，

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &\approx [\cos(\Omega t/2) - i \sin(\Omega t/2)] e^{-i\omega t/2} |\psi_+(t)\rangle \\ &\approx e^{-i\omega_0 t/2} |\psi_+(t)\rangle \exp[-i\omega t(1 - \cos\theta)/2] \end{aligned}$$

- 正如预期， $|\Psi(t)\rangle$ 仍是电子自旋向上的能量本征态，属于能量本征值 $E_+(t) = \hbar\omega_0/2$ 。
- $|\Psi(t)\rangle$ 表达式右端的第一个相因子是动力学相因子：

$$e^{-i\omega_0 t/2} = \exp\left[-i \int_0^t E_+(\tau) d\tau / \hbar\right]$$

动力学相正比于绝热过程持续的时间 t 。

- 第二个相因子就是所谓 Berry 相因子 $e^{i\gamma_+(t)}$,

$$\gamma_+(t) = -\frac{1}{2}(1 - \cos \theta)\omega t$$

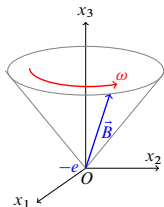
如果此绝热演化持续的时间恰好为磁场进动的周期 T 、使 $\vec{B}(t)$ 沿与 x_3 轴成 θ 角的纬线上旋转一周, $t = T = 2\pi/\omega$, 我们看到:

$$\gamma_+(T) = -\pi(1 - \cos \theta)$$

- 按立体几何, 球面上一条极角为 θ 的纬线所围的曲面对于球心所张的立体角是:

$$\begin{aligned}\Theta &= \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^\theta \sin \alpha d\alpha \\ &= 2\pi(1 - \cos \theta) = -2\gamma_+(T)\end{aligned}$$

它也等同于 $\vec{B}(t)$ 进动一周在单位球面上扫过的小球缺的面积.



所以, $\gamma_+(T)$ 是几何相:

$$\gamma_+(T) = -\Theta/2$$

- ① $\gamma_+(T)$ 的大小取决于 $\vec{B}(t)$ 绝热进动一周时所形成纬线的几何位置 θ .
- ② $\gamma_+(T)$ 的大小与 $\vec{B}(t)$ 绝热进动一周所花费的时间无关、亦即与磁场进动角速度 ω 的大小无关¹.

几何相的进一步分析:

我们已经看到: 对于由含时哈密顿算符 $\hat{H}(t)$ 描写的量子力学体系所经历的绝热过程而言, 若体系的初态为 $\hat{H}(t_i)$ 的第 n 个本征态:

$$|\Psi(t_i)\rangle = |\psi_n(t_i)\rangle$$

¹当然, 绝热近似条件 $\omega \ll \omega_0 = e\mathcal{B}/\mu$ 必须满足.

在经历了绝热演化之后体系将处在 $\hat{H}(t_f)$ 的第 n 个本征态：

$$|\Psi(t_f)\rangle = |\psi_n(t_f)\rangle \exp[i\beta_n(t_f) + i\gamma_n(t_f)]$$

与 $|\psi_n(t_f)\rangle$ 相比， $|\Psi(t_f)\rangle$ 仅仅增加了一个含时相因子，其中

$$\beta_n(t_f) = -\frac{1}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} E_n(t) dt$$

是动力学相，而

$$\gamma_n(t_f) = i \int_{t_i}^{t_f} dt \langle \psi_n(t) | \frac{\partial}{\partial t} \psi_n(t) \rangle$$

是几何相。

请问：几何相的存在有没有实在的物理意义？

在含时哈密顿算符的本征值方程

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

中, 倘若 $\hat{H}(t)$ 对于时间 t 的依赖是通过一组参数实现的²:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}(\zeta_1(t), \zeta_2(t), \dots, \zeta_N(t))$$

那么一般情形下, 也有:

$$|\psi_n(t)\rangle = |\psi_n(\zeta_1(t), \zeta_2(t), \dots, \zeta_N(t))\rangle := |\psi_n(\zeta)\rangle.$$

如此一来,

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(t)\rangle = \sum_{i=1}^N \frac{d\zeta_i}{dt} \frac{\partial}{\partial \zeta_i} |\psi_n(\zeta)\rangle = \frac{d\vec{\zeta}}{dt} \cdot \nabla_{\zeta} |\psi_n(\zeta)\rangle$$

最后一步在参数空间引进了辅助矢量 $\vec{\zeta}$ 以及相应的梯度运算:

$$\vec{\zeta} = \sum_{i=1}^N \zeta_i(t) \vec{e}_i, \quad \nabla_{\zeta} = \sum_{i=1}^N \vec{e}_i \frac{\partial}{\partial \zeta_i}.$$

²不失一般性, 我们假设参数空间是维数为 N 的欧氏空间.

在这种情形下，绝热演化产生的几何相可等价地表达为参数空间中的如下线积分：

$$\gamma_n(t_f) = i \int_{\vec{\zeta}_i}^{\vec{\zeta}_f} \langle \psi_n(\zeta) | \nabla_{\zeta} \psi_n(\zeta) \rangle \cdot d\vec{\zeta}$$

如果经过一段时间 T 的绝热演化之后，体系的哈密顿算符回到了初始形式，那么最终产生的几何相就是：

$$\gamma_n(T) = i \oint \langle \psi_n(\zeta) | \nabla_{\zeta} \psi_n(\zeta) \rangle \cdot d\vec{\zeta}$$

- ① $\gamma_n(T)$ 的上述表达式是 Berry 建立的，故常称其为 Berry 相。
- ② $\gamma_n(T)$ 是沿参数空间中一条闭合回路的线积分。一般而论，它并不为零。
- ③ $\gamma_n(T)$ 仅仅依赖于参数空间计算线积分时所选择的积分路径，它不依赖沿这条路径体系绝热演化过程进行的快慢程度。

如果参数空间是三维欧氏空间, $N=3$, 则利用 3 维欧氏空间中的 Stokes 定理:

$$\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r} = \iint_S (\nabla \times \vec{A}) \cdot d\vec{s}$$

可以把 Berry 相写成参数空间中的面积分:

$$\gamma_n(T) = i \iint_S [\nabla_\zeta \times \langle \psi_n(\zeta) | \nabla_\zeta \psi_n(\zeta) \rangle] \cdot d\vec{s}$$

例题：

仍考虑在时变磁场中静止在原点处的电子的自旋态随时间的绝热演化。

静止于旋转磁场原点处的电子的哈密顿算符可表为：

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 [\vec{\sigma} \cdot \vec{n}(t)]$$

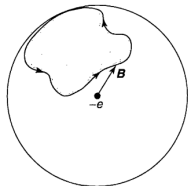
式中， $\omega_0 = e\mathcal{B}/\mu$ ，且：

$$\vec{n}(t) = \vec{e}_3 \cos \theta + \vec{e}_1 \sin \theta \cos \phi + \vec{e}_2 \sin \theta \sin \phi$$

这里的参数 θ 和 ϕ 均依赖于时间 t 。

$\hat{H}(t)$ 属于本征值 $E_+ = \hbar\omega_0/2$ 的本征态矢量可在泡利表象中写为：

$$|\psi_+(t)\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2)e^{i\phi} \end{bmatrix} = \cos(\theta/2) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \sin(\theta/2)e^{i\phi} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$



梯度算符在球坐标系中的表达式为：

$$\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{e}_\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\vec{e}_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

所以，

$$\begin{aligned} \nabla |\psi_+(t)\rangle &= -\frac{\vec{e}_\theta}{2r} \sin(\theta/2) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{\vec{e}_\theta}{2r} e^{i\phi} \cos(\theta/2) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ &\quad + i \frac{\vec{e}_\phi}{r \sin \theta} \sin(\theta/2) e^{i\phi} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

因此：

$$\langle \psi_+(t) | \nabla \psi_+(t) \rangle = i \sin^2(\theta/2) \frac{\vec{e}_\phi}{r \sin \theta}$$

上式在参数空间的旋度为：

$$\begin{aligned} \nabla \times \langle \psi_+(t) | \nabla \psi_+(t) \rangle &= i \nabla \times \left[\sin^2(\theta/2) \frac{\vec{e}_\phi}{r \sin \theta} \right] \\ &= i \nabla [\sin^2(\theta/2)] \times \frac{\vec{e}_\phi}{r \sin \theta} = i \frac{\vec{e}_r}{2r^2} \end{aligned}$$

计算此旋度时，我们使用了数学恒等式

$$\nabla \times (F\vec{G}) = \nabla F \times \vec{G} + F\nabla \times \vec{G}$$

以及：

$$\nabla \times \left(\frac{\vec{e}_\phi}{r \sin \theta} \right) = 0$$

所以，Berry 相最终表达为：

$$\gamma_+(T) = -\frac{1}{2} \iint_S \frac{\vec{e}_r}{r^2} \cdot d\vec{s}$$

式中面积分的区域 S 是 $\vec{B}(t)$ 在球面上扫过一周所围的面积，所以 $d\vec{s} = r^2 d\Theta \vec{e}_r$ ，我们得到：

$$\gamma_+(T) = -\frac{1}{2} \iint d\Theta = -\Theta/2$$

这个计算进一步佐证了 Berry 相的几何属性。

Aharonov-Bohm 效应:

现在我们讨论 Berry 相的物理现实性。为此，首先考察一下带电粒子在电磁场中运动时的 Aharonov-Bohm 效应：矢势可以影响带电粒子的量子行为，即便是它在不存在磁感应强度分布的区域中运动。

按照经典电动力学，电磁场的电磁势 (\vec{A}, φ) 是不可以直接测量的辅助物理量。真正有物理意义的是电磁场的场强矢量：

$$\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

电磁势的选择有一定程度的任意性。可以对势作如下规范变换：

$$\varphi \rightsquigarrow \varphi' = \varphi - \frac{\partial\Lambda}{\partial t}, \quad \vec{A} \rightsquigarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla\Lambda$$

其中 $\Lambda = \Lambda(\vec{r}, t)$ 允许是带电粒子位置与时间的任意函数，称为规范变换函数。显然，场强矢量不受规范变换的任何影响。

带电粒子与电磁场的相互作用在量子力学中使用明显依赖于电磁势 (φ, \vec{A}) 的哈密顿算符

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left(-i\hbar\nabla - q\vec{A} \right)^2 + q\varphi$$

描写，但含时薛定谔方程

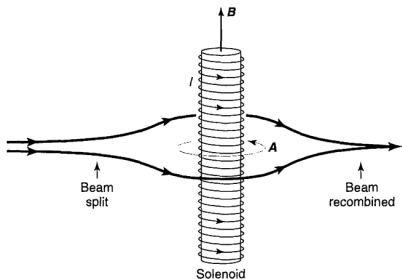
$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2\mu} \left(-i\hbar\nabla - q\vec{A} \right)^2 + q\varphi \right] \psi$$

具有规范变换

$$\psi \rightsquigarrow \psi' = \psi e^{iq\Lambda/\hbar}, \quad \varphi \rightsquigarrow \varphi' = \varphi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}, \quad \vec{A} \rightsquigarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla \Lambda$$

下的不变性。鉴于此，在相当长一段时间内物理学界倾向于认为带电粒子在场强为零的区域中运动时不会受到电磁场的影响³。

³1959年 Aharonov 与 Bohm 的论文发表之前。



Aharonov 与 Bohm 考虑了在通电螺线管外部空间中运动的电子. 按照经典电动力学, 只要螺线管足够长, 那么它内部的磁场是均匀的、外部的磁场则为零:

$$\vec{B} = \begin{cases} \mathcal{B}\hat{k}, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}$$

这里用参数 a 表示螺线管的横截面半径.

但矢势的分布在螺线管内、外空间皆不为零.

取库仑规范 ($\nabla \cdot \vec{A} = 0$), 不难看出⁴:

$$\vec{A} = \begin{cases} \vec{e}_\phi \mathcal{B}r/2, & r < a \\ \vec{e}_\phi \mathcal{B}a^2/(2r), & r > a \end{cases}$$

⁴这里采取了圆柱坐标系.

上述矢势分布的正确性检验如下. 在圆柱坐标系中,

$$\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{e}_\phi}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial z}$$

此式意味着: $\nabla r = \vec{e}_r$, $\nabla \phi = \vec{e}_\phi / r$ 与 $\nabla z = \hat{k}$. 由于梯度场无旋, 我们有:

$$0 = \nabla \times \nabla \phi = \nabla \times \left(\frac{\vec{e}_\phi}{r} \right)$$

以及,

$$\vec{e}_\phi = \hat{k} \times \vec{e}_r = \nabla z \times \nabla r = \nabla \times (z \nabla r)$$

再注意到旋度场无散, 我们又有: $\nabla \cdot \vec{e}_\phi = 0$. 利用这两个数学恒等式, 在螺线管内部空间:

$$\nabla \times \vec{A} = \nabla \times \left(\frac{1}{2} \mathcal{B} r \vec{e}_\phi \right) = \frac{1}{2} \mathcal{B} \nabla r^2 \times \frac{\vec{e}_\phi}{r} = \mathcal{B} \vec{e}_r \times \vec{e}_\phi = \mathcal{B} \hat{k} = \vec{B}$$

$$\nabla \cdot \vec{A} = \nabla \cdot \left(\frac{1}{2} \mathcal{B} r \vec{e}_\phi \right) = \frac{1}{2} \mathcal{B} \nabla r \cdot \vec{e}_\phi = \frac{1}{2} \mathcal{B} \vec{e}_r \cdot \vec{e}_\phi = 0$$

而在螺线管外部空间：

$$\nabla \times \vec{A} = \nabla \times \left(\frac{1}{2} \mathcal{B} a^2 \frac{\vec{e}_\phi}{r} \right) = \frac{1}{2} \mathcal{B} a^2 \nabla \times \left(\frac{\vec{e}_\phi}{r} \right) = 0$$

$$\nabla \cdot \vec{A} = \nabla \cdot \left(\frac{1}{2} \mathcal{B} a^2 \frac{\vec{e}_\phi}{r} \right) = \frac{1}{2} \mathcal{B} a^2 \nabla \frac{1}{r} \cdot \vec{e}_\phi = -\frac{1}{2} \mathcal{B} \frac{\vec{e}_r}{r^2} \cdot \vec{e}_\phi = 0$$

证毕。在 $\nabla \times \vec{A} = 0$ 的单连通区域⁵，

$$\oint_C \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' = \iint_S [\nabla' \times \vec{A}(\vec{r}')] \cdot d\vec{S}' = 0$$

因此， $\nabla \times \vec{A} = 0$ 区域中的任意一点 \vec{r} 均可联系于一个函数：

$$\Lambda(\vec{r}) = \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}'$$

其中 \vec{r}_0 是在此区域内任意选定的参考点。注意此定义仅在无磁感应强度分布、即 $\nabla \times \vec{A} = 0$ 的区域成立，否则线积分将依赖于从 \vec{r}_0 到 \vec{r} 的路径、从而不能看作 \vec{r} 的函数。

⁵本例情形下此区域即就是螺线管外部空间，那里无磁感应强度分布。

综上所述可知：通电长螺线管外部空间是磁感应强度为零、但矢势分布不为零的区域。如果带电粒子在此区域中运动，含时薛定谔方程即为：

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2\mu} (-i\hbar \nabla - q\vec{A})^2 + V(\vec{r}) \right] \psi$$

式中的有效势能 $V(\vec{r})$ 可以包含、也可以不包含电的贡献 $q\varphi$ 。现按波函数的概率诠释对其进行规范变换：

$$\psi \rightsquigarrow \psi' = \psi \exp \left[-i \frac{q}{\hbar} \Lambda(\vec{r}) \right], \quad \Lambda(\vec{r}) = \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}'.$$

我们看到： $\psi = \psi' e^{iq\Lambda(\vec{r})/\hbar}$ ，且：

$$\nabla \psi = \left[\nabla \psi' + i \frac{q}{\hbar} \nabla \Lambda(\vec{r}) \right] e^{iq\Lambda(\vec{r})/\hbar} = \left[\nabla \psi' + i \frac{q}{\hbar} \vec{A}(\vec{r}) \right] e^{iq\Lambda(\vec{r})/\hbar}$$

所以，

$$(-i\hbar \nabla - q\vec{A})\psi = -i\hbar e^{iq\Lambda(\vec{r})/\hbar} \nabla \psi'$$

进而，

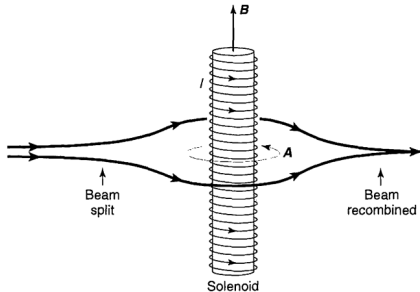
$$(-i\hbar \nabla - q\vec{A})^2 \psi = -\hbar^2 e^{iq\Lambda(\vec{r})/\hbar} \nabla^2 \psi'$$

含时薛定谔方程可以通过规范变换后的波函数表达为：

$$i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi' + V(\vec{r}) \psi'$$

令人惊讶的是： ψ' 竟然满足不含 \vec{A} 的薛定谔方程。如果我们能求出此方程的解 ψ' ，那么求矢势存在情形下含时薛定谔方程解 ψ 的程序就变得很容易： $\psi = \psi' e^{iq\Lambda(\vec{r})/\hbar}$ 。

Aharonov 与 Bohm 设计了一个实验：一束电子被分成两部分，各沿长通电螺线管的一边经过、然后汇聚。电子束和螺线管保持足够的距离，以使电子束只在磁感应强度为零、但矢势非零的螺线管外部空间中运动。



电子束重新汇聚后，汇聚点处的波函数为：

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}, t) &= \psi'_1(\vec{r}, t)e^{\left(\frac{iq}{\hbar} \int_{\Gamma_1} \vec{A} \cdot d\vec{r}\right)} + \psi'_2(\vec{r}, t)e^{\left(\frac{iq}{\hbar} \int_{\Gamma_2} \vec{A} \cdot d\vec{r}\right)} \\ &= e^{\left(\frac{iq}{\hbar} \int_{\Gamma_1} \vec{A} \cdot d\vec{r}\right)} \left[\psi'_1(\vec{r}, t) + \psi'_2(\vec{r}, t)e^{\left(\frac{iq}{\hbar} \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r}\right)} \right]\end{aligned}$$

式中 $\oint_C = \int_{\Gamma_2} - \int_{\Gamma_1}$ 。回路 C 环绕着通电螺线管，因此它不在单连通区域， $\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r} \neq 0$ 。事实上，

$$\oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r} = \int_0^{2\pi} \left(\frac{\mathcal{B}a^2}{2r} \vec{e}_\phi \right) \cdot (\vec{e}_\phi r d\phi + \cdots) = \mathcal{B}a^2 \pi = \Phi_B$$

所以，汇聚点处两束电子因为矢势非零而具有的位相差为：

$$\Delta = \frac{q}{\hbar} \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{r} = q\Phi_B/\hbar$$

这个相移是两束电子波函数之间的相对位相差，它可以导致可测量物理量的干涉。Aharonov-Bohm 的论文发表的第二年，钱伯斯 (Chambers) 等人就从实验室证实了这个效应。

Aharonov-Bohm 效应表明：在电磁场强为零的区域中仍然可以有电磁效应。当然，它并不意味着矢势 A 本身可以测量，真正有可观测效应的是矢势沿闭合曲线的积分、即磁通量。

作业 (Optional):

- 1 请证明：Aharonov-Bohm 效应是几何相的一个特例。