

# 简单强关联系统中简并态的二时关联函数研究

鲨鱼辣椒

(安徽大学 物理与材料科学学院, 安徽 合肥 230039)

**摘要:** 这篇论文由两个部分组成。第一部分着眼于关联函数, 也叫做格林函数, 是凝聚态物理系统中的重要研究对象。我们将从著名的散射问题开始, 介绍散射态和散射矩阵, 然后用一个定理来说明为什么时间序列的算符乘积在物理上是重要的——这是物理系统对环境变化的某种反馈。随后用时间序列的算符乘积定义关联函数, 并推导关联函数满足性质和一些实际作用。之后我们会讨论用来计算关联函数的工具Schwinger-Dyson方程, 给出几个具体的例子, 并讨论一般情况下可能的计算思路。第二部分谈的是Berry相, 这是物理系统中纯粹的几何相位。我们将在绝热近似的背景下给出阿贝尔和非阿贝尔Berry相的一般讨论, 然后分别推导出阿贝尔Berry相可能的计算方法、非阿贝尔Berry相的定义问题、规范协变性和数值思路, 以及计算几个具体的例子。

**关键词:** 散射矩阵; 外场变分; 关联函数; Schwinger-Dyson方程; 绝热近似; Berry相; 规范协变性;

## Study of two-time correlation functions for simple strongly correlated systems

Shark Chili

(School of Physics & Material Science, Anhui University, Hefei 230039, China)

**Abstract:** This thesis is composed by two parts. The first part is focused on correlation function, also called Green function, which is a important object in modern condensed matter physics. We will start from famous scattering problems, introducing scattering states and scattering matrix, and explaining why time-series product of operators, which is some kind of feedback of physical system against the environment, is important in physics using a theorem. Then some detailed properties and applications in reality is introduced. Schwinger-Dyson equation is a main topic, using whom we will calculate several examples and throw some arguments on general methods of calculation. The second part of this thesis is on Berry phase, pure geometric phase in physical system. In the context of adiabatic approximation, we will talk generally about Abelian Berry phase and non-Abelian Berry phase. Possible formulas on Abelian Berry phase and problem of the definition, gauge covariance and numerical recipes of non-Abelian Berry phase is discussed.

**Keywords:** scattering matrix; external field variation; correlation function; Schwinger-Dyson equation; adiabatic approximation; Berry phase; gauge covariance

散射矩阵 (scattering matrix, S-矩阵) 是物理学家用来联系散射实验中初态和末态的理论工具, 一般被用在量子力学和量子场论中。更加形式化地说, 在量子场论的背景下, 散射矩阵是联系不同渐进自由粒子态集合 (入态和出态) 的幺正矩阵。自由粒子态指的是在Lorentz变换(1)下呈现为单粒子态张量积的量子态[23] (物理学家一般称其为直积态)。渐进自由态则是在“遥远的过去”或“遥远的将来”有这种行为的状态。

$$U(\Lambda, a) \Psi_{p_1 \sigma_1 n_1; p_2 \sigma_2 n_2 \dots} = e^{-ia_\mu((\Lambda p_1)^\mu + (\Lambda p_2)^\mu + \dots)} \sqrt{\frac{(\Lambda p_1)^0 (\Lambda p_2)^0 \dots}{p_1^0 p_2^0 \dots}} \times \sum_{\sigma'_1 \sigma'_2 \dots} D_{\sigma'_1 \sigma_1}^{(j_1)}(W(\Lambda, p_1)) D_{\sigma'_2 \sigma_2}^{(j_2)}(W(\Lambda, p_2)) \dots \Psi_{\Lambda p_1 \sigma'_1 n_1; \Lambda p_2 \sigma'_2 n_2 \dots} \quad (1)$$

尽管S-矩阵可以定义在任何渐进可解同时又没有事件视界的时空背景上, 但在Minkowski空间中其有简单的形式。在这个特殊的情形下, 态空间是庞加莱群的一个不可约酉表示空间, S-矩阵则是遥远的过去”( $t \rightarrow -\infty$ )到“遥远的将来”(“ $t \rightarrow +\infty$ )的时间演化算符在这个Hilbert空间中的表示。

如果给哈密顿量加上一些依赖外场的项，那么S-矩阵的对外场参数的变分将自然给出时间序列的关联函数，这个结论将在1.1.3中证明。

在多体理论中，关联函数和格林函数通常指同一个对象，即场算符或者产生湮灭算符的“相关因子”，具体的形式将在相关的章节中给出。“格林函数”一词来自非齐次微分方程求解中的“格林函数法”，但这和多体理论中的格林函数并不十分相关。具体来说，只有无相互作用系统中的两点格林函数才是微分方程理论中的格林函数，对应的线性算子是关于场算符二次形式的哈密顿量。

用Julian Schwinger和Freeman Dyson的名字命名的Schwinger-Dyson方程以运动方程的形式给出了不同关联函数之间的关系，有时也被比作场论中的Euler-Lagrange方程。

在"The S-Matrix in Quantum electrodynamics"[5] 这篇文章中，Dyson用微扰的方法，通过对无穷多个费曼图求和推导出不同S-矩阵元（单粒子格林函数）之间的关系。随后Schwinger用他的变分方法，非微扰地计算出了一系列关联函数满足的方程[20]，把Dyson的方程推广到了场论中格林函数满足的Schwinger-Dyson方程。Schwinger-Dyson方程给出了处理量子场论的非微扰方法，这在今天的凝聚态物理和粒子物理中有相当多的应用。

由于Schwinger-Dyson给出的结构基本上由算符的代数控制，所以作为一个插曲，我们将讨论在数学物理中极重要的Clifford代数的分解问题。除了在数学物理中的用途，Clifford代数也是计算机视觉中计算的有力工具。

论文的第二部分与第一部分关系并不大，这是因为我们起初在研究两个自旋问题时发现对于简并的基态Schwinger-Dyson方程给出的关联函数和实空间的计算结果无法吻合，所以决定去看看非阿贝尔Berry相中是否有类似的现象。后来发现原来是用来计算的Mathematica程序中有错误，改正后得到了吻合的结果。作为毕业论文，我把所了解到的关于Berry相的故事也一并放在这里。

在经典和量子物理中，几何相位是与绝热过程中的回路相关的相位差，起源与哈密顿量参数空间的几何与拓扑性质[21]。这个现象由 T. Kato (1950), S. Pancharatnam (1956) 和 H. C. Longuet-Higgins (1958) 分别独立发现，最后由 Sir Michael Berry (1984) 推广，所以也叫做Pancharatnam-Berry相，Pancharatnam相 或者 Berry相。在这篇文章中我们会看到相应的复值相位或矩阵值相位如何在绝热近似的背景下出现，以及如何计算。

在没有特殊说明的时候，取自然单位 $\hbar = 1, c = 1$ 。

## 1 散射矩阵与关联函数

### 1.1 散射矩阵

#### 1.1.1 散射态

大量无相互作用粒子的量子态空间可以认为是：各自单粒子态空间构成的张量积空间模掉对称和反对称的2-理想，在经典的教科书中，模掉对称理想得到的像称为玻色子的态空间，反对称的则称为费米子的态空间。因而单体算符在多粒子空间中的表示可以由在单粒子态空间的表示简单推广得到[29]。

将无相互作用粒子作为整体的哈密顿量本征态记为 $|\Phi_\alpha\rangle$ ， $\alpha$ 包含了离散和连续的指标，对应的能量为

$$H|\Phi_\alpha\rangle = E_\alpha|\Phi_\alpha\rangle,$$

当系统中存在局域相互作用时，这样的关系则只有当粒子处于无穷远( $t \rightarrow \pm\infty$ )时才满足。散射实验中的相互作用就是的一个这样的例子。

认为 $t \rightarrow \pm\infty$ 时粒子的状态可以近似为某个无相互作用态 $|\Phi_\alpha\rangle$ ，我们可以把真实的状态标记为 $|\Psi_\alpha^{\text{in}}\rangle$ 和 $|\Psi_\alpha^{\text{out}}\rangle$ ，其中 $|\Psi_\alpha^{\text{in}}\rangle$ 是 $t \rightarrow -\infty$ 时包含一些近似处于 $|\Phi_\alpha\rangle$ 态粒子对应的真实量子态， $|\Psi_\alpha^{\text{out}}\rangle$ 是 $t \rightarrow +\infty$ 时包含一些近似处于 $|\Phi_\alpha\rangle$ 态粒子对应的真实量子态。这里讨论的是Heisenberg表象下的量子态。

当存在时间零点不重合的相对静止的惯性系观察者时，不同观察者“看到”的量子态可以用时间平移算符相联系。假定当O系时钟 $t = \tau$ 时O'系时钟 $t' = 0$ ，二系时间由 $t' = t - \tau$ 相联系，那么当O系观察者认为系统处于量子态 $|\Psi\rangle$ ，O'系观察者认为系统处于量子态

$$|\Psi'\rangle = U(\tau)|\Psi\rangle = \exp(-i H \tau)|\Psi\rangle$$

将算符 $\exp(-i H \tau)$ ,  $\tau \rightarrow \pm\infty$ 作用到散射中的量子态 $|\Psi_a\rangle$ 就散射实验发生很久以前和很久以后的量子态。由于能量本征态不是时间局域的, 时间演化算符引入的因子 $\exp(-i E_a \tau)$ 在 $\tau \rightarrow \pm\infty$ 时的性质不那么好, 我们将考虑叠加态, 同时也是真实的物理状态——波包。

现在将散射态 $|\Psi_a^{\text{in}}\rangle$ 记为 $|\Psi_a^+\rangle$ ,  $|\Psi_a^{\text{out}}\rangle$ 记为 $|\Psi_a^-\rangle$ , 正号意味着一个粒子进入系统, 负号则意味着离开系统。哈密顿量可以表示成自由的部分 $H_0$ 和相互作用的部分 $V$

$$H = H_0 + V$$

从量子力学中知道, 自由哈密顿量的本征态构成一组完备基

$$\begin{aligned} H_0 |\Phi_\alpha\rangle &= E_\alpha |\Phi_\alpha\rangle \\ \langle \Phi_\alpha | \Phi_{\alpha'} \rangle &= \delta(\alpha - \alpha'), (\alpha \text{ 为复合指标}) \end{aligned}$$

经过上面的讨论, 我们可以为标记为 $\alpha$ 的弹性散射实验中的散射态联系上类似的本征值方程 (因为弹性散射中粒子的总能量守恒)

$$H |\Psi_\alpha^\pm\rangle = E_\alpha |\Psi_\alpha^\pm\rangle,$$

同时 $\tau \rightarrow \mp\infty$ 时的行为可以表示为

$$\begin{aligned} \exp(-i H \tau) \int d\alpha g(\alpha) |\Psi_\alpha^\pm\rangle &= \int d\alpha e^{-i E_\alpha \tau} g(\alpha) |\Psi_\alpha^\pm\rangle \\ &\quad \downarrow \tau \rightarrow \mp\infty \\ \exp(-i H_0 \tau) \int d\alpha g(\alpha) |\Phi_\alpha\rangle &= \int d\alpha e^{-i E_\alpha \tau} g(\alpha) |\Phi_\alpha\rangle \end{aligned}$$

$g(\alpha)$ 是定义域内的光滑函数。这样我们就得到了

$$\int d\alpha g(\alpha) |\Psi_\alpha^\pm\rangle \xrightarrow{\tau \rightarrow \mp\infty} \exp(i H \tau) \exp(-i H_0 \tau) \int d\alpha g(\alpha) |\Phi_\alpha\rangle$$

或者等价地, 在积分的意义下

$$|\Psi_\alpha^\pm\rangle = \Omega(\mp\infty) |\Phi_\alpha\rangle \quad (1.1)$$

其中 $\Omega(\tau) = \exp(i H \tau) \exp(-i H_0 \tau)$ 。

### 1.1.2 散射矩阵元

散射矩阵 (scattering matrix, S矩阵) 是现代物理中描述的散射过程的主要实验量[23], 其矩阵元定义为

$$S_{\beta\alpha} := \langle \Psi_\beta^- | \Psi_\alpha^+ \rangle$$

即  $\alpha$  入态在  $\beta$  出态上的投影。

理论工作中常常认为散射矩阵 ( $S_{\beta\alpha}$ ) 是某个算符  $S$  在自由粒子态空间中的表示

$$S_{\beta\alpha} := \langle \Phi_\beta | S | \Phi_\alpha \rangle$$

该算符称为  $S$  算符。

从公式(1.1)中可以得到 $S = U(\infty, -\infty)$ 和

$$\begin{aligned} U(\tau, \tau_0) &= \Omega^\dagger(\tau) \Omega(\tau_0) \\ &= e^{i H_0 \tau} e^{-i H(\tau - \tau_0)} e^{-i H_0 \tau_0} \end{aligned} \quad (1.2)$$

对 $U(\tau, \tau_0)$ 求 $\tau$ 的导数

$$i \frac{d}{d\tau} U(\tau, \tau_0) = V(\tau) U(\tau, \tau_0) \quad (1.3)$$

$V(t)$ 是相互作用表象中哈密顿量的相互作用部分

$$V(t) = e^{i H_0 t} V e^{-i H_0 t}$$

公式(1.3)给出了 $U$ 算符满足的积分方程（积分即可得到）

$$U(\tau, \tau_0) = 1 - i \int_{\tau_0}^{\tau} dt V(t) U(t, \tau_0)$$

迭代得到

$$\begin{aligned} U(\tau, \tau_0) = & 1 - i \int_{\tau_0}^{\tau} dt_1 V(t_1) + (-i)^2 \int_{\tau_0}^{\tau} dt_1 \int_{\tau_0}^{t_1} dt_2 V(t_1) V(t_2) \\ & + (-i)^3 \int_{\tau_0}^{\tau} dt_1 \int_{\tau_0}^{t_1} dt_2 \int_{\tau_0}^{t_2} dt_3 V(t_1) V(t_2) V(t_3) + \cdots \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} S = U(\infty, -\infty) = & 1 - i \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 V(t_1) + (-i)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 V(t_1) V(t_2) \\ & + (-i)^3 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \int_{-\infty}^{t_2} dt_3 V(t_1) V(t_2) V(t_3) + \cdots \end{aligned}$$

下面将这个式子改写成更为对称的形式。

观察可以发现

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n V(t_1) \cdots V(t_n) = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n V(t_1) \cdots V(t_n) \theta(t_1 - t_2) \cdots \theta(t_{n-1} - t_n), \quad (1.4)$$

其中

$$\theta(x - y) = \begin{cases} 1, & x > y \\ 0, & x < y \end{cases}$$

是用来保持顺序 $t_1 > \cdots > t_n$ 的因子。式(1.4)右端的积分现在对 $t_1, \dots, t_n$ 是置换对称的，即交换符号 $t_i$ 和 $t_j$ 积分值不变。

记式(1.4)右端被积函数对 $t_1, \dots, t_n$ 的所有置换求和为时序符号 $T$

$$T\{V(t_1) \cdots V(t_n)\} = \sum_{\sigma \in S_n} V(t_{\sigma(1)}) \cdots V(t_{\sigma(n)}) \theta(t_{\sigma(1)} - t_{\sigma(2)}) \cdots \theta(t_{\sigma(n-1)} - t_{\sigma(n)})$$

$S_n$ 是 $n$ 阶对称群。积分变量的置换对称性保证了

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n T\{V(t_1) \cdots V(t_n)\} = \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n V(t_1) \cdots V(t_n) \theta(t_1 - t_2) \cdots \theta(t_{n-1} - t_n),$$

所以

$$S = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n T\{V(t_1) \cdots V(t_n)\}. \quad (1.5)$$

式(1.5)也称为Dyson级数[5].

### 1.1.3 外场变分: 关联函数

当哈密顿量的相互作用部分  $V$  中含有外场时

$$V_{\epsilon}(t) = V(t) + \sum_a \int d^3\mathbf{x} \epsilon_a(\mathbf{x}, t) o_a(\mathbf{x}, t),$$

其中 ‘current’  $o_a(t)$  是相互作用表象下的算符

$$o_a(t) = e^{iH_0 t} o_a(t) e^{-iH_0 t},$$

此时散射矩阵对参数在零外场极限下的变分等于时间序列的关联函数

$$\left. \frac{\delta^r S_{\beta\alpha}[\epsilon]}{\delta\epsilon_{a_1}(x_1) \cdots \delta\epsilon_{a_r}(x_r)} \right|_{\epsilon=0} = \langle \Psi_{\beta}^- | T\{-i O_{a_1}(x_1), \cdots, -i O_{a_r}(x_r)\} | \Psi_{\alpha}^+ \rangle, \quad (1.6)$$

其中  $O_a$  是  $o_a$  对应的海森堡表象算符

$$O_a(\mathbf{x}, t) = e^{iHt} o_a(\mathbf{x}, 0) e^{-iHt} = \Omega(t) o(\mathbf{x}, t) \Omega^{-1}(t), \quad (1.7)$$

$$\Omega(t) = e^{iHt} e^{-iH_0 t}$$

我不知道这个定理最初是谁证明的, M. Gell-Mann和F. E. Low在1950年代早期就知道它了[25]。下面是证明。

从式(1.5)可以知道

$$S = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int dt_1 \cdots dt_n \times$$

$$T \left\{ \left[ V(t_1) + \sum_a \int d^3 \mathbf{x}_1 \epsilon_a(\mathbf{x}_1, t_1) o_a(\mathbf{x}_1, t_1) \right] \cdots \left[ V(t_n) + \sum_a \int d^3 \mathbf{x}_n \epsilon_a(\mathbf{x}_n, t_n) o_a(\mathbf{x}_n, t_n) \right] \right\}$$

所以式(1.6)左端可以写成

$$\frac{\delta^r S_{\beta\alpha}[\epsilon]}{\delta\epsilon_{a_1}(x_1) \cdots \delta\epsilon_{a_r}(x_r)} \Big|_{\epsilon=0} = \left\langle \Phi_\beta \left| \frac{\delta^r}{\delta\epsilon_{a_1}(x_1) \cdots \delta\epsilon_{a_r}(x_r)} \Big|_{\epsilon=0} \left( \sum_{n=r}^{\infty} [\cdots] \right) \right| \Phi_\alpha \right\rangle$$

$$= \left\langle \Phi_\beta \left| \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{r+n}}{n!} \int dt_1 \cdots dt_n T \{ V(t_1) \cdots V(t_n) o_{a_1}(x_1) \cdots o_{a_r}(x_r) \} \right| \Phi_\alpha \right\rangle, \quad (1.8)$$

其中用到了

$$\frac{\delta}{\delta\epsilon_{a_1}(x_1)} \int dt_1 \cdots dt_n \times$$

$$T \left\{ \left[ V(t_1) + \sum_a \int d^3 \mathbf{x}_1 \epsilon_a(\mathbf{x}_1, t_1) o_a(\mathbf{x}_1, t_1) \right] \cdots \left[ V(t_n) + \sum_a \int d^3 \mathbf{x}_n \epsilon_a(\mathbf{x}_n, t_n) o_a(\mathbf{x}_n, t_n) \right] \right\}$$

$$= n \int dt_2 \cdots dt_n \times$$

$$T \left\{ \left[ V(t_2) + \sum_a \int d^3 \mathbf{x}_2 \epsilon_a(x_2) o_a(x_2) \right] \cdots \left[ V(t_n) + \sum_a \int d^3 \mathbf{x}_n \epsilon_a(x_n) o_a(x_n) \right] o_{a_1}(x_1) \right\}.$$

即将 $n$ 重积分降为 $n-1$ 重会多出排列因子 $n$ 。 $x_n$ 是四维矢量 $(\mathbf{x}_n, t_n)$ , 时间是时空坐标的第0分量 $t_i = x_i^0$ 。

式(1.8)中 $x_1, \dots, x_r$ 将时间轴分割成 $r+1$ 份, 现在按积分变量 $t_1, \dots, t_n$ 落在不同的部分的可能情形改写时序符号和积分。

假定 $x_1^0 > \cdots > x_r^0$ , 将 $t_1, \dots, t_n$ 重新标记为 $t_{0,1}, \dots, t_{0,n_0}, \dots, t_{r,1}, \dots, t_{r,n_r}$ ,  $\sum_{k=0}^r n_k = n$ , 其中 $t_{0,i_0} > x_1^0$ ,  $x_k^0 > t_{k,i_k} > x_{k+1}^0$ ,  $t_{r,i_r} < x_r^0$ 。  $t_1, \dots, t_n$ 落在 $n+1$ 个子区间里共有 $\frac{n!}{n_0!n_1!\cdots n_r!}$ 种方式, 因此式(1.8)可以改写为

$$\frac{\delta^r S_{\beta\alpha}[\epsilon]}{\delta\epsilon_{a_1}(x_1) \cdots \delta\epsilon_{a_r}(x_r)} \Big|_{\epsilon=0} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^{n+r}}{n!} \sum_{n_0+\cdots+n_r=n} \frac{n!}{n_0!n_1!\cdots n_r!} \times$$

$$\int_{x_1^0}^{\infty} dt_{0,1} \cdots dt_{0,n_0} \int_{x_2^0}^{x_1^0} dt_{1,1} \cdots dt_{1,n_1} \cdots \int_{-\infty}^{x_r^0} dt_{r,1} \cdots dt_{r,n_r} \times$$

$$\langle \Phi_\beta | T \{ V(t_{0,1}) \cdots V(t_{0,n_0}) \} o_{a_1}(x_1) \cdots o_{a_r}(x_r) T \{ V(t_{r,1}) \cdots V(t_{r,n_r}) \} | \Phi_\alpha \rangle$$

由于 $(n_1, \dots, n_r) \in \mathbb{N}^r$ 中的每一个元素都能取到, 将求和改为对 $n_1, \dots, n_r$ 的直接求和

$$\frac{\delta^r S_{\beta\alpha}[\epsilon]}{\delta\epsilon_{a_1}(x_1) \cdots \delta\epsilon_{a_r}(x_r)} \Big|_{\epsilon=0} = (-i)^r \sum_{n_0=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_r=0}^{\infty} \frac{(-i)^{n_0+\cdots+n_r}}{n_0! \cdots n_r!} \times$$

$$\int_{x_1^0}^{\infty} dt_{0,1} \cdots dt_{0,n_0} \int_{x_2^0}^{x_1^0} dt_{1,1} \cdots dt_{1,n_1} \cdots \int_{-\infty}^{x_r^0} dt_{r,1} \cdots dt_{r,n_r} \times$$

$$\langle \Phi_\beta | T \{ V(t_{0,1}) \cdots V(t_{0,n_0}) \} o_{a_1}(x_1) \cdots o_{a_r}(x_r) T \{ V(t_{r,1}) \cdots V(t_{r,n_r}) \} | \Phi_\alpha \rangle$$

$$= (-i)^r \langle \Phi_\beta | U(\infty, x_1^0) o_{a_1}(x_1) \cdots o_{a_r}(x_r) U(x_r^0, -\infty) | \Phi_\alpha \rangle$$

其中用到了

$$U(t, t') = 1 + \int_{t'}^t d\tau_1 \cdots d\tau_n T\{V(\tau_1) \cdots V(\tau_n)\}$$

用式(1.5)同样的办法可以很容易得到这个关系。

由式(1.1),(1.2),(1.7)可以得到

$$\begin{aligned} \frac{\delta^r S_{\beta\alpha}[\epsilon]}{\delta\epsilon_{a_1}(x_1) \cdots \delta\epsilon_{a_r}(x_r)}|_{\epsilon=0} &= (-i)^r \langle \Phi_\beta | \Omega^\dagger(\infty) \Omega(x_1^0) o_{a_1}(x_1) \cdots o_{a_r}(x_r) \Omega^\dagger(x_r^0) \Omega(-\infty) | \Phi_\alpha \rangle \\ &= (-i)^r \langle \Omega(\infty) \Phi_\beta | \Omega(x_1^0) o_{a_1}(x_1) \Omega^\dagger(x_1^0) \cdots \Omega(x_r^0) o_{a_r}(x_r) \Omega^\dagger(x_r^0) | \Omega(-\infty) \Phi_\alpha \rangle \\ &= (-i)^r \langle \Psi_\beta^- | O_{a_1}(x_1) \cdots O_{a_r}(x_r) | \Psi_\alpha^+ \rangle \end{aligned}$$

这样我们就证明了式(1.6)：时间序列的关联函数给出了零外场极限下，散射矩阵的变分。

## 1.2 关联函数

在这一节中为了让量纲清晰，保留 $\hbar$ 。

“关联”一词的由来就是因为它形象地描述了“在先前时刻放置一个粒子，在后来的时刻进行测量”这两个事件之间的关联性质。关联函数的重要性不仅体现在它是散射矩阵的变分，作为物理系统的算符，其本身也能给出系统的很多性质。

由于篇幅限制，这里默认了二次量子化的背景知识。 $c_\alpha^\dagger, c_\alpha$ 是单粒子哈密顿量 $h_1$ 本征态对应的产生和湮灭算符

$$\begin{aligned} h_1 |\alpha\rangle &= \epsilon_\alpha |\alpha\rangle \\ c_\alpha^\dagger |0\rangle &= |\alpha\rangle, \\ c_\alpha |\alpha\rangle &= |0\rangle \end{aligned} \quad (1.9)$$

$\psi^\dagger(\vec{r}), \psi(\vec{r})$ 是定域态对应的产生和湮灭算符，有时也叫做场算符

$$\begin{aligned} \psi^\dagger(\vec{r}) |0\rangle &= |\vec{r}\rangle \\ \psi(\vec{r}) |\vec{r}\rangle &= |0\rangle, \end{aligned} \quad (1.10)$$

记 $|\alpha\rangle$ 在 $|\vec{r}\rangle$ 上的投影为 $u_\alpha(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \alpha \rangle$ ， $c_\alpha^\dagger, c_\alpha$ 和 $\psi^\dagger(\vec{r}), \psi(\vec{r})$ 之间的关系由(1.11)给出

$$\begin{aligned} \psi^\dagger(\vec{r}) &= \sum_\alpha c_\alpha^\dagger \langle \alpha | \vec{r} \rangle = \sum_\alpha c_\alpha^\dagger u_\alpha^*(\vec{r}) \\ \psi(\vec{r}) &= \sum_\alpha c_\alpha \langle \vec{r} | \alpha \rangle = \sum_\alpha c_\alpha u_\alpha(\vec{r}) \end{aligned} \quad (1.11)$$

这个关系很容易用两种产生算符的定义(1.9)(1.10)证明。直接积分也能够验证逆变换

$$\begin{aligned} c_\alpha^\dagger &= \int d^3\vec{r} \psi^\dagger(\vec{r}) u_\alpha(\vec{r}) \\ c_\alpha &= \int d^3\vec{r} \psi(\vec{r}) u_\alpha^*(\vec{r}) \end{aligned} \quad (1.12)$$

或者直接由 $|\alpha\rangle = c_\alpha^\dagger |0\rangle = \int d^3\vec{r} u_\alpha(\vec{r}) |\vec{r}\rangle$ 看出。类似的关系对动量空间的定域算符 $\psi^\dagger(\vec{p}), \psi(\vec{p})$ 也成立，其对应的波函数与 $u_\alpha(\vec{r})$ 由傅立叶变换相联系。

### 1.2.1 单粒子传播子

单粒子传播子是时间演化算符的矩阵元。单粒子Schrödinger方程 $i\hbar \partial_t |\Psi(t)\rangle = h_1 |\Psi(t)\rangle$ 和哈密顿量的本征值方程 $h_1 |\phi_n\rangle = \epsilon_n |\phi_n\rangle$ 给出单粒子态的时间演化

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= e^{-i h_1 t / \hbar} |\Psi(0)\rangle \\ &= \sum_n |\phi_n\rangle e^{-i \epsilon_n t / \hbar} \langle \phi_n | \Psi(0) \rangle, \end{aligned}$$



波函数—一定域基上的坐标也可以写出

$$\begin{aligned}\langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle &= \sum_n \langle \vec{r} | \phi_n \rangle e^{-i\epsilon_n t/\hbar} \langle \phi_n | \int d^3\vec{r}' |\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}' | \Psi(0) \rangle \\ &= \int d^3\vec{r}' \underbrace{\sum_n \langle \vec{r} | \phi_n \rangle e^{-i\epsilon_n t/\hbar} \langle \phi_n | \vec{r}' \rangle}_{G(\vec{r}, \vec{r}'; t)} \langle \vec{r}' | \Psi(0) \rangle,\end{aligned}$$

其中 $G(\vec{r}, \vec{r}'; t)$ 称为传播子, 包含了 $|\Psi(0)\rangle$ 在空间的分布以何种形式影响 $|\Psi(t)\rangle$ 。

用二次量子化改写内积 $\langle \phi_n | \vec{r} \rangle = \langle \phi_n | \psi^\dagger(\vec{r}) | 0 \rangle$ ,  $\psi^\dagger(\vec{r})$ 是 $\vec{r}$ 处的产生算符。这个内积给出了「在 $\vec{r}$ 处放置一个粒子, 随后立即测量它, 并发现其处在 $|\phi_n\rangle$ 上」的概率。这个概念更容易推广到多粒子的情形。

## 1.2.2 关联函数

这一章后面的部分采用Heisenberg绘景。如果哈密顿量中不含时, 海森堡绘景下定域的产生算符和能量本征态的产生算符可以写为

$$\begin{aligned}\psi_s^\dagger(\vec{r}, t) &= e^{iHt/\hbar} \psi_s^\dagger(\vec{r}) e^{-iHt/\hbar} \\ c_\alpha^\dagger(\vec{r}, t) &= e^{iHt/\hbar} c_\alpha^\dagger(\vec{r}) e^{-iHt/\hbar},\end{aligned}$$

$s$ 表示可能存在的内部自由度。多体哈密顿量 $H = H_0 + V$ 的本征方程分别给出

$$\begin{aligned}H |\Psi_n^N(t)\rangle &= E_n^N |\Psi_n^N(t)\rangle \\ H_0 |\Phi_n^N(t)\rangle &= E_n^{(0), N} |\Phi_n^N(t)\rangle,\end{aligned}$$

上指标 $N$ 表示 $N$ 粒子态, 下指标 $n$ 表示第 $n$ 个本征矢。

用时间序列的算符乘积在基态上的期望值定义两点关联函数 (也称为两点格林函数)

$$g_{ss'}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -\frac{i}{\hbar} \langle \Psi_0^N | T[\psi_s(\vec{r}, t) \psi_{s'}^\dagger(\vec{r}', t')] | \Psi_0^N \rangle, \quad (1.13)$$

其中

$$T[\psi_s(\vec{r}, t) \psi_{s'}^\dagger(\vec{r}', t')] = \theta(t - t') \psi_s(\vec{r}, t) \psi_{s'}^\dagger(\vec{r}', t') \pm \theta(t' - t) \psi_{s'}^\dagger(\vec{r}', t') \psi_s(\vec{r}, t)$$

玻色子取正号, 费米子取负号。两点关联函数(1.13)描述了态 $|\Psi_0^N\rangle$ 上单个粒子或空穴的传播, 所以 $g_{ss'}(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ 有时也叫做传播子。

如果哈密顿量中不存在对时间的依赖性 $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ , 两点关联函数的算符乘积中含时的部分可以被显式地写出来

$$\begin{aligned}g_{ss'}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') &= -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') \langle \Psi_0^N | \psi_s(\vec{r}) e^{-i(H - E_0^N)(t - t')/\hbar} \psi_{s'}^\dagger(\vec{r}') | \Psi_0^N \rangle \\ &\quad \mp \frac{i}{\hbar} \theta(t' - t) \langle \Psi_0^N | \psi_{s'}^\dagger(\vec{r}') e^{i(H - E_0^N)(t - t')/\hbar} \psi_s(\vec{r}) | \Psi_0^N \rangle,\end{aligned}$$

由于这个表达式中与 $t$ 和 $t'$ 相关的就只有 $t - t'$ , 将其记为 $\tau$ ,  $g_{ss'}(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ 可以简单写为 $g_{ss'}(\vec{r}, \vec{r}'; \tau)$ 。

用(1.14) (这个关系用留数定理很容易证明) 替换 $\theta$ 函数后

$$\theta(\pm\tau) = \mp \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega\tau} d\omega}{\omega \pm i\eta}, \quad (1.14)$$

傅立叶变换能给出更多信息

$$\begin{aligned}g_{ss'}(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) &= \int d\tau e^{i\omega\tau} g_{ss'}(\vec{r}, \vec{r}'; \tau) \\ &= g_{ss'}^p(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) + g_{ss'}^h(\vec{r}, \vec{r}'; \omega),\end{aligned}$$

其中 $g_{ss'}^p(\vec{r}, \vec{r}'; \omega)$ 和 $g_{ss'}^h(\vec{r}, \vec{r}'; \omega)$ 分别为

$$\begin{aligned} g_{ss'}^p(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) &= \int d\tau e^{i\omega\tau} \left[ -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \langle \Psi_0^N | \psi_s(\vec{r}) e^{-i(H-E_0^N)(t-t')/\hbar} \psi_{s'}^\dagger(\vec{r}') | \Psi_0^N \rangle \right] \\ &= \langle \Psi_0^N | \psi_s(\vec{r}) \left( -\frac{i}{\hbar} \right) \left( -\frac{1}{2\pi i} \right) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega\tau} d\omega}{\omega + i\eta} e^{-i(H-E_0^N)\tau/\hbar} \psi_{s'}^\dagger(\vec{r}') | \Psi_0^N \rangle}_{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega' + i\eta} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \exp\left(-i\left(\frac{H-E_0^N}{\hbar} + \omega' - \omega\right)\tau\right)} \\ &= \langle \Psi_0^N | \psi_s(\vec{r}) \frac{1}{\hbar\omega - (H - E_0^N) + i\eta} \psi_{s'}^\dagger(\vec{r}') | \Psi_0^N \rangle \end{aligned}$$

和

$$g_{ss'}^h(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) = \mp \langle \Psi_0^N | \psi_{s'}^\dagger(\vec{r}') \frac{1}{\hbar\omega + (H - E_0^N) - i\eta} \psi_s(\vec{r}) | \Psi_0^N \rangle,$$

其中上指标 $p$ 和 $h$ 意为“粒子” (p, particle) 和空穴 (h, hole), 因为此时的态分别相对 $N$ 体基态多和少一个粒子。

同样的故事可以也发生在哈密顿量本征态对应的产生和湮灭算符上, 类似地定义两点关联函数

$$g_{\alpha\beta}(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \langle \Psi_0^N | T[c_\alpha(t) c_\beta^\dagger(t')] | \Psi_0^N \rangle,$$

直接替换(1.11)可以得到空间表象两点关联函数和能量表象两点关联函数之间的关系

$$g_{ss'}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \sum_{\alpha\beta} u_\alpha(\vec{r}) g_{\alpha\beta}(t, t') u_\beta^*(\vec{r}'),$$

同样地 $g_{\alpha\beta}(t, t')$ 可以记为 $g_{\alpha\beta}(\tau)$ , 以及

$$\begin{aligned} g_{\alpha\beta}(\omega) &= \int d\tau e^{i\omega\tau} g_{\alpha\beta}(\tau) \\ &= \langle \Psi_0^N | c_\alpha \frac{1}{\hbar\omega - (H - E_0^N) + i\eta} c_\beta^\dagger | \Psi_0^N \rangle \mp \langle \Psi_0^N | c_\beta^\dagger \frac{1}{\hbar\omega + (H - E_0^N) - i\eta} c_\alpha | \Psi_0^N \rangle, \end{aligned} \quad (1.15)$$

也可以在(1.15)中插入对应子空间的完备基, 得到

$$g_{\alpha\beta}(\omega) = \underbrace{\sum_n \frac{\langle \Psi_0^N | c_\alpha | \Psi_n^{N+1} \rangle \langle \Psi_n^{N+1} | c_\beta^\dagger | \Psi_0^N \rangle}{\hbar\omega - (E_n^{N+1} - E_0^N) + i\eta}}_{g_{\alpha\beta}^p(\omega)} \mp \underbrace{\sum_n \frac{\langle \Psi_0^N | c_\beta^\dagger | \Psi_n^{N-1} \rangle \langle \Psi_n^{N-1} | c_\alpha | \Psi_0^N \rangle}{\hbar\omega - (E_0^N - E_n^{N-1}) - i\eta}}_{g_{\alpha\beta}^h(\omega)},$$

这个形式称为Lehmann表示[13]。可以看到关联函数的极点给出系统的激发能量 $E_n^{N+1} - E_0^N$ 或 $E_0^N - E_n^{N-1}$ 。

两点关联函数傅立叶变换的虚部给出谱函数。作为线性泛函的核, (1.16)给出分母的一种展开方式

$$\frac{1}{x \pm i\eta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x), \quad (1.16)$$

$\mathcal{P} \frac{1}{x}$ 是主值积分。定义单谱函数

$$\begin{aligned} S_{\alpha\beta}^p(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im } g_{\alpha\beta}^p(\omega) \\ &= \sum_n \langle \Psi_0^N | c_\alpha | \Psi_n^{N+1} \rangle \langle \Psi_n^{N+1} | c_\beta^\dagger | \Psi_0^N \rangle \delta(\hbar\omega - (E_n^{N+1} - E_0^N)) \\ S_{\alpha\beta}^h(\omega) &= \frac{1}{\pi} \text{Im } g_{\alpha\beta}^h(\omega) \\ &= \mp \sum_n \langle \Psi_0^N | c_\beta^\dagger | \Psi_n^{N-1} \rangle \langle \Psi_n^{N-1} | c_\alpha | \Psi_0^N \rangle \delta(\hbar\omega - (E_0^N - E_n^{N-1})) \end{aligned}$$



谱函数的对角部分  $S_{\alpha\alpha}^p, S_{\alpha\alpha}^h$  给出了增加或减少一个粒子，使剩下的系统处于能量为  $\hbar\omega$  的激发态的概率

$$S_{\alpha\alpha}^p(\omega) = \sum_n |\langle \Psi_n^{N+1} | c_\alpha^\dagger | \Psi_0^N \rangle|^2 (\hbar\omega - (E_n^{N+1} - E_0^N))$$

$$S_{\alpha\alpha}^h(\omega) = \mp \sum_n |\langle \Psi_n^{N-1} | c_\alpha | \Psi_0^N \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - (E_0^N - E_n^{N-1}))$$

值得注意的是，谱函数是关联函数的虚部，但关联函数却能由谱函数完全给出

$$g_{\alpha\beta}(\omega) = \int d\omega' \frac{S_{\alpha\beta}^p(\omega')}{\omega - \omega' + i\eta} + \int d\omega' \frac{S_{\alpha\beta}^h(\omega')}{\omega - \omega' - i\eta}.$$

关联函数也可以用来计算可观测量的期望值。

单体密度矩阵  $\rho_{\alpha\beta} = \langle \Psi_0^N | c_\beta^\dagger c_\alpha | \Psi_0^N \rangle$  可以用传播子写出来

$$\rho_{\alpha\beta} = \pm i \hbar \left( -\frac{i}{\hbar} \right) \lim_{t' \rightarrow t^+} \langle T[c_\alpha(t) c_\beta^\dagger(t')] \rangle = \pm i \hbar \lim_{t' \rightarrow t^+} g_{\alpha\beta}(t, t'),$$

或者等价地，用谱函数写出来

$$\rho_{\alpha\beta} = \hbar \int d\omega \langle \Psi_0^N | c_\beta^\dagger | \Psi_n^{N-1} \rangle \langle \Psi_n^{N-1} | c_\alpha | \Psi_0^N \rangle \delta(\hbar\omega - (E_0^N - E_n^{N-1})) = \mp \hbar \int d\omega S_{\alpha\beta}^h(\omega).$$

所以算符  $O = \sum_{\alpha\beta} o_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta$  在基态上的期望可以用密度矩阵写为

$$\langle \Psi_0^N | O | \Psi_0^N \rangle = \left\langle \sum_{\alpha\beta} o_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta \right\rangle = \sum_{\alpha\beta} o_{\alpha\beta} \rho_{\beta\alpha},$$

所以

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0^N | O | \Psi_0^N \rangle &= \pm i \hbar \lim_{t' \rightarrow t^+} \sum_{\alpha\beta} o_{\alpha\beta} g_{\beta\alpha}(t, t') \\ &= \mp \hbar \int d\omega \sum_{\alpha\beta} o_{\alpha\beta} S_{\beta\alpha}^h(\omega) \end{aligned} \quad (1.17)$$

### 1.2.3 例子：两体相互作用下的基态能量与关联函数

对于包含两体相互作用的哈密顿量

$$H = T + V = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\sigma} v_{\alpha\beta,\gamma\sigma} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\sigma c_\gamma,$$

系统在  $|\Psi_0^N\rangle$  上的基态能量可以由单体格林函数给出，这是哈密顿量的特殊形式导致的，下面来推导这个关系。

写下 Heisenberg 方程

$$i \hbar \frac{d}{dt} c_\alpha(t) = e^{iHt/\hbar} [c_\alpha, H] e^{-iHt/\hbar},$$

等式  $[A, BC] = [A, B]C - B[C, A] = \{A, B\}C - B\{C, A\}$ （直接验证即可）保证了对易子  $[c_\alpha, H]$  对玻色子和费米子有一致的形式

$$[c_\alpha, H] = \sum_{\beta} t_{\alpha\beta} c_\beta + \frac{1}{2} \sum_{\beta\gamma\sigma} v_{\alpha\beta,\gamma\sigma} c_\beta^\dagger c_\sigma c_\gamma, \quad (1.18)$$

可以证明类似的性质对只含有偶数个算符乘积的  $H$  成立，碍于篇幅，这里不展开描述。

(1.18)可以用来计算传播子对时间的导数

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} g_{\alpha\beta}(t-t') &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left\{ -\frac{i}{\hbar} \langle T[c_\alpha(t) c_\beta^\dagger(t')] \rangle \right\} \\
&= \delta(t-t') \langle c_\alpha(t) c_\beta^\dagger(t) \pm c_\beta^\dagger(t) c_\alpha(t) \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle T[[c_\alpha(t), H] c_\beta^\dagger(t')] \rangle, \\
&= \delta(t-t') \delta_{\alpha\beta} + \sum_\gamma t_{\alpha\gamma} g_{\gamma\beta}(t-t') - \frac{i}{2\hbar} \sum_{\rho\gamma\sigma} v_{\alpha\rho, \gamma\sigma} \langle T[c_\rho^\dagger(t) c_\sigma(t) c_\gamma(t) c_\beta^\dagger(t')] \rangle
\end{aligned}$$

利用上一节的结果(1.17)可以得到

$$\begin{aligned}
\pm i\hbar \lim_{t' \rightarrow t^\pm} \sum_\alpha \frac{\partial}{\partial t} g_{\alpha\alpha}(t-t') &= \frac{1}{i\hbar} (\pm i\hbar) \lim_{t' \rightarrow t^\pm} \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} g_{\beta\alpha}(t-t') \\
&\quad + \frac{1}{i\hbar} \left( \pm \frac{1}{2} \right) \sum_{\alpha\rho\gamma\sigma} v_{\alpha\rho, \gamma\sigma} \langle T[\pm c_\alpha^\dagger(t) c_\rho^\dagger(t) c_\sigma(t) c_\gamma(t)] \rangle. \\
&= \frac{1}{i\hbar} (\langle T \rangle + 2 \langle V \rangle)
\end{aligned}$$

另一方面, 注意到  $\lim_{t' \rightarrow t^+} \sum_\alpha \frac{\partial}{\partial t} g_{\alpha\alpha}(t-t') = \sum_\alpha \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \frac{\partial}{\partial \tau} g_{\alpha\alpha}(\tau)$ , 傅立叶变换给出

$$\begin{aligned}
\lim_{\tau \rightarrow 0^-} \frac{\partial}{\partial \tau} g_{\alpha\beta}(\tau) &= \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega\tau} g_{\alpha\beta}(\omega) \\
&= \frac{1}{2\pi} \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \frac{\partial}{\partial \tau} \int d\omega e^{-i\omega\tau} \int d\omega' \frac{S_{\alpha\beta}^p(\omega')}{\omega - \omega' + i\eta} + \int d\omega' \frac{S_{\alpha\beta}^h(\omega')}{\omega - \omega' - i\eta} \\
&= \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \frac{\partial}{\partial \tau} \int d\omega' e^{-i\omega'\tau} \frac{1}{2\pi} \left[ S_{\alpha\beta}^p(\omega') \int \frac{d\omega e^{-i(\omega-\omega')\tau}}{\omega - \omega' + i\eta} + S_{\alpha\beta}^h(\omega') \int \frac{d\omega e^{-i(\omega-\omega')\tau}}{\omega - \omega' - i\eta} \right] \\
&= \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \frac{\partial}{\partial \tau} \int d\omega' e^{-i\omega'\tau} [-i S_{\alpha\beta}^p(\omega') \theta(\tau) + i S_{\alpha\beta}^h(\omega') \theta(-\tau)] \\
&= \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \int d\omega \omega e^{-i\omega\tau} S_{\alpha\beta}^h(\omega) \\
&= \int d\omega \omega S_{\alpha\beta}^h(\omega)
\end{aligned}$$

所以基态能量  $\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$  可以用上面两个部分表示出来

$$\begin{aligned}
\langle H \rangle &= \frac{1}{2} \left[ i\hbar \left( \pm i\hbar \lim_{t' \rightarrow t^\pm} \sum_\alpha \frac{\partial}{\partial t} g_{\alpha\alpha}(t-t') \right) \pm i\hbar \lim_{t' \rightarrow t^\pm} \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} g_{\beta\alpha}(t, t') \right], \\
&= \pm \frac{i\hbar}{2} \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \sum_{\alpha\beta} \left( i\hbar \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial \tau} + t_{\alpha\beta} \right) g_{\beta\alpha}(\tau)
\end{aligned}$$

类似地, 也可以用谱函数的积分写出来。这个关系是由Galitski、Migdal[6]以及Kolutn[11][12]独立给出的。当相互作用包含三体或更多粒子间的相互作用, 高阶格林函数就会自然出现能量中。

## 1.3 关联函数的时间演化

### 1.3.1 Schwinger-Dyson方程

类似Schrödinger方程给出量子态的时间演化, Schwinger-Dyson方程给出关联函数的时间演化。这一节我们以格点上的情形为例推导Schwinger-Dyson方程,  $c[i] = c_i(t_i)$ ,  $c^\dagger[i] = c_i^\dagger(t_i)$ ,  $c_i, c_i^\dagger$  分别是第*i*个格点上的湮灭和产生算符。定义关联函数

$$\begin{aligned}
iG[i, f] &= \langle T_\eta[c[i] c^\dagger[f]] \rangle \\
&= \langle \theta(t_i - t_f) c[i] c^\dagger[f] + \eta \theta(t_f - t_i) c^\dagger[f] c[i] \rangle,
\end{aligned} \tag{1.19}$$

其中 $\eta = \begin{cases} 1 & \text{for boson} \\ -1 & \text{for fermion} \end{cases}$ 。方程(1.19)对时间 $t_i$ 求导可以得到

$$\begin{aligned} i \partial_{t_i} G[i, f] &= \delta(t_i - t_f) \left\langle \underbrace{c[i] c^\dagger[f] - \eta c^\dagger[f] c[i]}_{\delta_{i,f}} \right\rangle + \langle T_\eta [(\partial_{t_i} c[i]) c^\dagger[f]] \rangle \\ &= \delta(t_i - t_f) \delta_{i,f} + \langle T_\eta [(\partial_{t_i} c[i]) c^\dagger[f]] \rangle \end{aligned} \quad (1.20)$$

方程(1.20)称为Schwinger-Dyson方程。非格点模型的Schwinger-Dyson方程也有着类似(1.20)的形式。

如果不存在相互作用，哈密顿量可以写为不同动量成分的简单和 $H = \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}}$ ，实空间和动量空间的算符由傅立叶变换相联系 $c_j = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} e^{i\vec{k}j}$ ，此时(1.20)有简单的解。首先 $\partial_{t_i} c[i]$ 由Heisenberg运动方程给出

$$\begin{aligned} \partial_{t_i} c_{\vec{k}}(t_i) &= \left[ c_{\vec{k}}(t_i), \sum_{\vec{k}'} \epsilon(\vec{k}') c_{\vec{k}'}^\dagger c_{\vec{k}'} \right] = \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}}(t_i) \\ \Rightarrow \partial_{t_i} c[i] &= \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}}(t_i) e^{i\vec{k}j} \end{aligned}$$

对(1.20)中两个空间指标作傅立叶变换得到较为简洁的形式

$$\begin{aligned} i \partial_{t_i} G[t_i, \vec{k}_i; t_f, \vec{k}_f] &= \delta(t_i - t_f) \delta_{\vec{k}_i, \vec{k}_f} + \delta_{\vec{k}_i, \vec{k}_f} G[i, f; \vec{k}_i] \epsilon_{\vec{k}} \\ \Rightarrow (i \partial_{t_i} - \epsilon_{\vec{k}}) G[i, f; \vec{k}] &= \delta(t_i - t_f) \\ \Rightarrow G[\omega, \vec{k}] &= \frac{1}{\omega - \epsilon_{\vec{k}}} \end{aligned}$$

最后一步对时间部分做傅立叶变换，得到频率空间的函数，从这里我们可以看出，关联函数的零点确实给出物理系统的激发谱。

$\partial_{t_i} c[i]$ 大部分情况下不能简单地耦合到(1.20)左端对应的关联函数上（下一节我们将会看到一个简单的例子），往往会有其他算符对应的关联函数。如果与某个格林函数相关的所有可能的格林函数数目是有限的，这个格林函数的计算就等价于一个一阶常微分方程组的求解，如果并不有限，那么其他格林函数往往以不同“层次”的形式出现在格林函数满足的Schwinger-Dyson方程中，这个“层次”称为Martin-Schwinger hierarchy[16]。

### 1.3.2 例子：磁场中的自旋

以自旋1/2为例

$$s^i = \frac{1}{2} \sigma^i$$

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

磁场在xoz平面内

$$H = -B^3 s^3 - B^1 s^1.$$

三个方向上的自旋算符导致了关联函数有九个分量

$$i G^{jk}[i, f] = \langle T[s^j(t_i) (s^k(t_f))^\dagger] \rangle = \langle T[s^j(t_i) s^k(t_f)] \rangle, \quad (1.21)$$

(1.21)对 $t_i$ 求导得到

$$i \partial_{t_i} G^{jk}[i, f] = \delta(t_i - t_f) M^{jk} + \langle T[(\partial_{t_i} s^j(t_i)) s^k(t_f)] \rangle, \quad (1.22)$$

其中 $M^{jk}$ 是系数矩阵

$$M^{jk} = \langle [s^j, s^k] \rangle = \sum_l i \epsilon^{jkl} \langle s^l \rangle$$

$$M = i \left\langle \begin{pmatrix} 0 & s^3 & -s^2 \\ -s^3 & 0 & s^1 \\ s^2 & -s^1 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle.$$

$\partial_{t_i} s^j(t_i)$ 由Heisenberg运动方程给出

$$\begin{aligned} i \partial_{t_i} \begin{pmatrix} s^1(t_i) \\ s^2(t_i) \\ s^3(t_i) \end{pmatrix} &= \begin{bmatrix} -B^3 s^3 - B^1 s^1, \\ \begin{pmatrix} s^1(t_i) \\ s^2(t_i) \\ s^3(t_i) \end{pmatrix} \end{bmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -i B^3 s^2(t_i) \\ i B^3 s^1(t_i) - i B^1 s^3(t_i) \\ i B^1 s^2(t_i) \end{pmatrix}, \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -i B^3 & 0 \\ i B^3 & 0 & -i B^1 \\ 0 & i B^1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s^1(t_i) \\ s^2(t_i) \\ s^3(t_i) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

将最后一行的系数矩阵记为 $\Delta = \begin{pmatrix} 0 & -i B^3 & 0 \\ i B^3 & 0 & -i B^1 \\ 0 & i B^1 & 0 \end{pmatrix}$ 。

这样我们就能将(1.22)显式地写出来

$$\begin{aligned} i \partial_{t_i} G^{jk}[i, f] &= \delta(t_i - t_f) M^{jk} + (-i) \sum_l \Delta^{jl} \langle T[s^l(t_i) s^k(t_f)] \rangle \\ &= \delta(t_i - t_f) M^{jk} + (-i) \sum_l \Delta^{jl} G^{lk}[i, f], \end{aligned}$$

或者写成矩阵形式

$$(i \partial_{t_i} - \Delta) G[i, f] = \delta(t_i - t_f) M, \quad (1.23)$$

傅立叶变换立即给出(1.23)的解

$$G[\omega] = (\omega - \Delta)^{-1} M. \quad (1.24)$$

$G[\omega]$ 的极点是系统的激发谱，由

$$(\omega - \Delta)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\omega^2 - (B^1)^2}{\omega(\omega^2 - b)} & \frac{i B^3}{-\omega^2 + b} & \frac{B^1 B^3}{\omega(-\omega^2 + b)} \\ -\frac{i B^3}{-\omega^2 + b} & -\frac{\omega}{-\omega^2 + b} & \frac{i B^1}{-\omega^2 + b} \\ \frac{B^1 B^3}{\omega(-\omega^2 + b)} & -\frac{i B^1}{-\omega^2 + b} & \frac{1 - \frac{(B^1)^2}{-\omega^2 + b}}{\omega} \end{pmatrix}, b = (B^1)^2 + (B^3)^2$$

确定。从中可以看出系统的激发能量只有 $\pm \sqrt{(B^1)^2 + (B^3)^2}$ 。

### 1.3.3 Clifford代数的分解

Clifford代数是一个由某个向量空间生成的带有二次形式的单位结合代数（这里讨论的都是实Clifford代数，复Clifford代数有更简单的结构[8]），推广了实数、复数、四元数等代数以及正交变换的概念[28]。

简单来说，Clifford代数是一个由基 $\{a_1, \dots, a_n, b_1, \dots, b_m\}$ 及其乘积张成的线性空间，其中基乘积的反对易子满足

$$\begin{aligned} \{a_i, a_j\} &:= a_i a_j + a_j a_i = 2 \delta_{ij} \\ \{b_i, b_j\} &= -2 \delta_{ij} \\ \{a_i, b_j\} &= 0 \end{aligned}, \quad (1.25)$$

将由这样一组基生成的Clifford代数记为 $\text{Cl}(n, m)$ 。

满足正则对易关系的 $n$ 对费米子产生-湮灭算符 $\{c_i^\dagger, c_i\}_i, c_i^\dagger c_j + c_j c_i^\dagger = \delta_{i,j}$ 张成的线性空间实际上构成了一个Clifford代数 $\text{Cl}(2n, 0)$ ，只是对应的标准基不是正则算符 $c_i^\dagger, c_i$ ，而是

$$\begin{aligned} e_i^+ &= c_i + c_i^\dagger \\ e_i^- &= \frac{1}{i}(c_i - c_i^\dagger) \end{aligned}$$

根据定义很容易验证

$$\begin{aligned} \{e_i^+, e_j^+\} &= \{c_i + c_i^\dagger, c_j + c_j^\dagger\} = \{c_i^\dagger, c_j\} + \{c_i, c_j^\dagger\} = 2\delta_{ij} \\ \{e_i^-, e_j^-\} &= -\{c_i - c_i^\dagger, c_j - c_j^\dagger\} = \{c_i^\dagger, c_j\} + \{c_i, c_j^\dagger\} = 2\delta_{ij} \\ \{e_i^+, e_j^-\} &= \frac{1}{i}\{c_i + c_i^\dagger, c_j - c_j^\dagger\} = \frac{-1}{i}[-\{c_i, c_j^\dagger\} + \{c_i^\dagger, c_j\}] = 0 \end{aligned}$$

这正是(1.25)中的代数，这样的一组基 $\{e_i^+, e_i^-\}$ 称为Majorana表象[18]。

自旋 $1/2$ 算符的李代数（对易子）也是嵌入在一个Clifford代数 $\text{Cl}(3, 0)$ 中的子结构， $[\sigma_i, \sigma_j] = i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$ 中的 $[\sigma_i, \sigma_j]$ 由 $\sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i$ 定义，这个乘法容易验证是由 $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ 生成的Clifford代数中的乘法。除此之外，Clifford代数与旋量以及现代物理中其他有趣的对象也有着千丝万缕的联系[4]。

不难想到，格点上的费米子模型和自旋 $1/2$ 模型中的算符代数各自是一个高维Clifford代数，如果能将高维度的Clifford代数分解成低维度Clifford代数的简单张量积，也许能给出某些问题的简单思路，下面就来讨论这个主题[15]。

假定 $\text{Cl}(p, q), p+q=n$ 由 $\{e^i\}_{1 \leq i \leq n}$ 生成， $e^i$ 与 $e^j$ 满足对易关系

$$\{e^i, e^j\} = \eta^{ij} e$$

$e$ 是Clifford代数的乘法单位元， $\eta^{ij}$ 是对角线上元素为 $\underbrace{(1, \dots, 1)}_p, \underbrace{(-1, \dots, -1)}_q$ 的对角矩阵。

作为线性空间， $\text{Cl}(p, q)$ 的基是

$$\begin{aligned} &e, e^{a_1}, e^{a_1 a_2}, \dots, e^{1, \dots, n} \\ e^{a_1 \dots a_k} &:= e^{a_1} \dots e^{a_k}, 1 \leq a_1 < \dots < a_k \leq n \end{aligned}$$

容易看出，类似外积空间 $\wedge^n V$ ， $\text{Cl}(p, q)$ 的维数是 $\dim \text{Cl}(p, q) = \sum_{j=0}^n \binom{n}{j} = 2^n$ 。

记

$$\begin{aligned} E_k &= e^{2k-1} e^{2k}, k=1, \dots, \left[\frac{n}{2}\right] \\ O_k &= \prod_{j=1}^{2k-1} e^j = e^{2k-1} \prod_{j=1}^{k-1} E_j, k=1, \dots, \left[\frac{n+1}{2}\right] \end{aligned} \quad (1.26)$$

$[m]$ 是不大于 $m$ 的最大整数。

(1.26)中若 $n$ 为偶数则有 $n/2$ 个 $E_k$ ，分别是 $e^1 e^2, \dots, e^{n-1} e^n$ ， $n$ 为奇数则有 $n/2 - 1$ 个，分别是 $e^1 e^2, \dots, e^{n-2} e^{n-1}$ 。同样地，若 $n$ 为偶数有 $\left[\frac{n+1}{2}\right] = \frac{n}{2}$ 个 $O_k$ ，此时有

$$\begin{cases} O_1 = e^1 \\ O_2 = e^1 e^2 e^3 \\ \vdots \\ O_{\frac{n}{2}} = e^{n-1} \underbrace{e^1 e^2}_{E_1} \dots \underbrace{e^{n-3} e^{n-2}}_{E_{\frac{n-2}{2}}} \end{cases}$$

若 $n$ 为奇数有 $\left[\frac{n+1}{2}\right] = \frac{n+1}{2}$ 个 $O_k$ ，此时有

$$\begin{cases} O_1 = e^1 \\ O_2 = e^1 e^2 e^3 \\ \vdots \\ O_{\frac{n+1}{2}} = e^n \underbrace{e^1 e^2}_{E_1} \dots \underbrace{e^{n-2} e^{n-1}}_{E_{\frac{n-1}{2}}} \end{cases}$$

总结起来就是,  $n$  为偶数有  $\lfloor \frac{n}{2} \rfloor = \frac{n}{2}$  对算符  $(O_k, E_k)$ ,  $n$  为奇数有  $\lfloor \frac{n}{2} \rfloor = \frac{n}{2} - 1$  对算符  $(O_k, E_k)$  和一个单独的  $O_{\frac{n+1}{2}}$ 。下面来证明一个由  $E_k$  和  $O_k$  给出  $e^k$  的公式

**命题 1.1.**  $e^1 = O_1, e^k = O_{\lfloor \frac{k+1}{2} \rfloor} \prod_{j=1}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} E_j, 2 \leq k \leq n$ .

**证明.**  $e^1 = O_1$  显然成立。

如果  $k > 1$  为奇数,  $O_{\lfloor \frac{k+1}{2} \rfloor} = O_{\frac{k+1}{2}} = e^k \prod_{j=1}^{\frac{k-1}{2}} E_j$ , 所以

$$O_{\lfloor \frac{k+1}{2} \rfloor} \prod_{j=1}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} E_j = e^k \prod_{j=1}^{\frac{k-1}{2}} E_j \prod_{l=1}^{\frac{k-1}{2}} E_l = e^k;$$

如果  $k > 1$  为偶数,  $O_{\lfloor \frac{k+1}{2} \rfloor} = O_{\frac{k}{2}} = e^{k-1} \prod_{j=1}^{\frac{k}{2}-1} E_j$ , 所以

$$\begin{aligned} O_{\lfloor \frac{k+1}{2} \rfloor} \prod_{j=1}^{\lfloor \frac{k}{2} \rfloor} E_j &= e^{k-1} \prod_{j=1}^{\frac{k}{2}-1} E_j \prod_{l=1}^{\frac{k}{2}} E_l \\ &= e^{k-1} E_{\frac{k}{2}} \\ &= e^{k-1} e^k \\ &= e^k \end{aligned}$$

□

这个命题说明了  $e^k$  及其乘积张成的空间与  $E_k, O_l$  及其乘积张成的空间是同一个空间。  $e^k$  适宜用来描述大的 Clifford 代数空间,  $E_k, O_l$  则能看出其中都有哪些“成分”, 下面这个定理可以直接用定义验证

**定理 1.2.**  $\forall k, l = 1, 2, \dots, \lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor$ , 若算符有定义, 则下列关系成立

$$\begin{aligned} [O_k, E_l] &= 0, k \neq l \\ [E_k, E_l] &= [O_k, O_l] = \{E_k, O_l\} = 0, \\ O_k^2 &= \pm e, E_k^2 = \pm e \end{aligned}$$

其中  $[\cdot, \cdot]$  是对易子,  $\{\cdot, \cdot\}$  是反对易子, 最后一行的正负号则视对应的  $e^k$  而定。

这个定理向我们展示了  $\text{Cl}(p, q)$  是一堆由  $\{E_k, O_k\}$  生成的 Clifford 代数的简单张量积。分解的细节可以在相关的文献[15]和专著[8]中找到。

### 1.3.4 例子：原子极限下的自旋关联

1.3.1 中曾提到, 当我们想通过 Schwinger-Dyson 方程(1.20)计算某个关联函数时, 等式右端往往会耦合到其他关联函数上。写下所有与之相关的关联函数满足的 Schwinger-Dyson 方程, 如果方程的数目是有限的, 傅立叶变换会给出这个微分方程组对应的线性方程, 问题就自然解决了。

实际上, 如果能证明与某个关联函数相联系的关联函数数目的有限性, 那么后续的工作完全可以自动化, 并交由计算机来解决。当问题考虑的系统有限大时, 有限多的独立算符必然导致有限多的关联函数, 这一节我们就来看一个这样的问题。

考虑原子极限下的无外场 Ising 模型, 系统只有  $a, b$  两个格点, 哈密顿量为

$$H = J s_a^z s_b^z,$$

关联函数则正比与  $\langle T_\eta [O_1(t_1) O_2(t_2)] \rangle$ 。其他不同的关联函数只能从(1.20)中的  $[H, c[i]]$  得到, 而哈密顿量和形如  $s_a^\rho s_b^\gamma$  的对易子同样是  $s_a^\rho s_b^\gamma$  的形式。所以不难想到, 可能有关的关联函数中的  $O_1$  和  $O_2$  只可能是算符集(1.27)中的算符

$$\{AB | A \in \{e, s_a^x, s_a^y, s_a^z\}, B \in \{e, s_b^x, s_b^y, s_b^z\}\}. \quad (1.27)$$

将可能算符的集合称为 $\{O^j\}$ ，二时关联函数定义为

$$i G^{jk}(t_i, t_f) = \langle T_\eta [O^j(t_i) O^k(t_f)] \rangle$$

Schwinger-Dyson方程是

$$\begin{aligned} i \partial_{t_i} G^{jk}(\tau) &= \delta(t_i - t_f) \langle O^j O^k - \eta O^k O^j \rangle - i \langle T_\eta [(i \partial_{t_i} O^j(t_i)) O^k(t_f)] \rangle \\ &= \delta(t_i - t_f) \langle O^j O^k - \eta O^k O^j \rangle - i \langle T_\eta [[O^j(t_i), H] O^k(t_f)] \rangle, \\ &= \delta(t_i - t_f) \langle O^j O^k - \eta O^k O^j \rangle + \sum_l c_{jl} G^{lk}(\tau) \end{aligned}$$

其中系数 $c_{jl}$ 由 $[O^j, H] = \sum_l c_{jl} O^l$ 给出，因为我们考虑的是算符的完备集合，这个线性组合总是可以写出来。傅立叶变换得到

$$\begin{aligned} \omega G^{jk}(\omega) &= M^{jk} + \sum_l c_{jl} G^{lk}(\omega) \\ \Rightarrow G(\omega) &= (\omega \mathbb{1} - c)^{-1} M \end{aligned}$$

其中系数矩阵 $M$ 中只包含波函数给出的信息以及 $\eta$ 的正负，最后只需要计算出 $(\omega \mathbb{1} - c)^{-1}$ 就能得到关联函数的极点。

对于这个模型，使用 $\{AB | A \in \{e, s_a^+, s_a^-, s_a^z\}, B \in \{e, s_b^+, s_b^-, s_b^z\}\}$ 作为完备的算符集，自动化的结果给出

$$(\omega \mathbb{1} - c)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\omega} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\omega}{k} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \frac{J}{k} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\omega}{k} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{4} \frac{J}{k} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\omega} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\omega}{k} & 0 & 0 & \frac{1}{4} \frac{J}{k} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\omega} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\omega} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J}{k} & 0 & 0 & \frac{\omega}{k} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\omega}{k} & 0 & 0 & -\frac{1}{4} \frac{J}{k} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\omega} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\omega} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{J}{k} & 0 & 0 & \frac{\omega}{k} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\omega} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{J}{k} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\omega}{k} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{J}{k} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\omega}{k} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\omega} \end{pmatrix},$$

其中 $k = \omega^2 - \frac{J^2}{4}$ ，由此可见激发谱是 $\pm \frac{J}{2}$ 。



## 2 Berry相

### 2.1 绝热近似

当系统发生改变时，哈密顿量及其本征矢系统会相应地改变。假定改变前的本征矢系统是 $\{|\Phi_n\rangle\}$ ，改变后是 $\{|\Phi'_m\rangle\}$ ，如果存在双射 $\phi: \{|\Phi_n\rangle\} \rightarrow \{|\Phi'_m\rangle\}$ ，称系统的变化“足够好”。后面会看到这一定义可以用来保证变换前后基的对应性。如果哈密顿量 $H[s]$ 依赖缓慢变化的参数 $s(t)$ ，不难想象如果 $s$ 变化足够慢，那么有限时间内系统的变化“足够好”。

下面的讨论假定系统的哈密顿量正是像这样依赖足够缓慢变化参数 $s(t)$  ( $s$ 可能含有多个分量 $s_i$ ) 的算符 $H[s]$ ，在这样的条件下，系统的性质可以通过两次么正变换来说明[27]。

对于确定的 $s$ ，哈密顿量的本征矢构成一组完备基

$$\begin{aligned} H[s] |\Phi_n[s]\rangle &= E_n[s] |\Phi_n[s]\rangle \\ \langle \Phi_n[s] | \Phi_m[s] \rangle &= \delta_{nm} \end{aligned} ,$$

不同 $s$ 对应的本征矢则相差一个么正变换，假定 $s(0) = s_0$

$$\begin{aligned} |\Phi_n[s]\rangle &= U[s] |\Phi_n[s_0]\rangle \\ U[s]^{-1} &= U[s]^\dagger \\ U[s_0] &= \mathbb{1} \end{aligned}$$

只要让 $U[s] = \sum_n |\Phi_n[s]\rangle \langle \Phi_n[s_0]|$ ，上面的关系就能够满足（可以写下这个求和因为系统的变化“足够好”）。

$H'[s] = U[s]^\dagger H[s] U[s]$ 在 $|\Phi_n[s_0]\rangle$ 上的作用有着类似于 $H[s]$ 在 $|\Phi_n[s]\rangle$ 上的行为

$$H'[s] |\Phi_n[s_0]\rangle = E_n[s] |\Phi_n[s_0]\rangle$$

记 $O_{nm} = \langle \Phi_n[s_0] | O | \Phi_m[s_0] \rangle$ ，有

$$H'_{nm}[s] = E_n[s] \delta_{nm}$$

#### 2.1.1 时间依赖Schrödinger方程

写下Schrödinger方程

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H[s(t)] |\Psi(t)\rangle$$

令 $|\Psi'(t)\rangle = U^\dagger[s(t)] |\Psi(t)\rangle$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} U[s(t)] |\Psi'(t)\rangle &= H[s(t)] U[s(t)] |\Psi'(t)\rangle \\ \Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi'(t)\rangle &= \left( U^\dagger H[s(t)] U - i\hbar U^\dagger \frac{d}{dt} U \right) |\Psi'(t)\rangle, \\ \Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi'(t)\rangle &= (H'[s(t)] + \Delta(t)) |\Psi'(t)\rangle \end{aligned} \quad (2.1)$$

其中 $\Delta(t) = i\hbar \left( \frac{d}{dt} U^\dagger \right) U$ ，因为 $\frac{d}{dt} (U^\dagger U) = 0$ 。

因为不能直接忽略 $\Delta(t)$ 项，现在需要施行第二次么正变换。定义 $V(t)$ 为方程(2.2)的解

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} V(t) = H'[s(t)] V(t) \\ V(0) = \mathbb{1} \end{cases} , \quad (2.2)$$

方程在基 $|\Phi_n[s_0]\rangle$ 可以表达为

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt} V_{nm}(t) = E_n[s(t)] V_{nm}(t) \\ V_{nm}(0) = \delta_{nm} \end{cases} ,$$

解是显然的

$$V_{nm}(t) = \delta_{nm} e^{i\phi_n(t)}, \quad \phi_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n[s(\tau)] d\tau,$$

同时容易发现 $V^\dagger V = \mathbb{1}$ 。

令  $|\Psi''(t)\rangle = V^{-1}(t) |\Psi'(t)\rangle$ ，方程(2.1)最后一式可以改写为

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} V(t) |\Psi''(t)\rangle &= (H'[s(t)] + \Delta(t)) V(t) |\Psi''(t)\rangle \\
 \Rightarrow i\hbar \left( \frac{dV(t)}{dt} |\Psi''(t)\rangle + V(t) \frac{d}{dt} |\Psi''(t)\rangle \right) &= (H'[s(t)] + \Delta(t)) V(t) |\Psi''(t)\rangle \quad (2.3) \\
 \xrightarrow{i\hbar \frac{d}{dt} V(t) = H'[s(t)] V(t)} i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi''(t)\rangle &= \underbrace{V^\dagger \Delta V}_{\Delta'(t)} |\Psi''(t)\rangle
 \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
 \Delta'_{nm}(t) &= \langle \Phi_n[s_0] | \Delta'(t) | \Phi_m[s_0] \rangle \\
 &= \sum_{i,j} \langle \Phi_n[s_0] | V^\dagger | \Phi_i[s_0] \rangle \langle \Phi_i[s_0] | \Delta(t) | \Phi_j[s_0] \rangle \langle \Phi_j[s_0] | V | \Phi_m[s_0] \rangle \\
 &= \Delta_{nm}(t) e^{i[\phi_m(t) - \phi_n(t)]} \\
 &= \Delta_{nm}(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t (E_n[s(t)] - E_m[s(t)]) dt \right\}
 \end{aligned}$$

### 2.1.2 无简并

如果  $s(t)$  的变化引起的  $\frac{E_n[s] - E_m[s]}{\hbar}$  变化远小于其值（这一条件只有在无简并时才可能发生），在任意有限的时间内，积分  $\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t (E_n[s(t)] - E_m[s(t)]) dt \right\}$  为一振荡项，所以对时间演化有作用的只有对角项。

忽略  $\Delta'_{nm}(t), n \neq m$ ，有

$$\Delta'_{nm}(t) = \delta_{nm} \Delta'_{nm}(t) = \delta_{nm} \rho_n(t)$$

其中

$$\begin{aligned}
 \rho_n(t) &= i\hbar \left[ \left( \frac{d}{dt} U^\dagger(t) \right) U(t) \right]_{nn} \\
 \xrightarrow{U[s] = \sum_n |\Phi_n[s]\rangle \langle \Phi_n[s_0]|} \sum_{m,m'} \langle \Phi_n[s_0] | i\hbar \frac{d}{dt} (|\Phi_m[s_0]\rangle \langle \Phi_m[s(t)]|) | \Phi_{m'}[s(t)] \rangle \langle \Phi_{m'}[s_0] | \Phi_n[s_0] \rangle, \\
 &= i\hbar \left( \frac{d}{dt} \langle \Phi_n[s(t)] | \right) | \Phi_n[s(t)] \rangle
 \end{aligned}$$

所以由方程(2.3)最后一式可以得到

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi''(t)\rangle &= \Delta'(t) |\Psi''(t)\rangle \\
 \Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Phi_n[s_0] | \Psi''(t) \rangle &= \rho_n(t) \langle \Phi_n[s_0] | \Psi''(t) \rangle \\
 \Rightarrow |\Psi''(t)\rangle &= \sum_n e^{i\gamma_n(t)} \langle \Phi_n[s_0] | \Psi''(0) \rangle | \Phi_n[s_0] \rangle
 \end{aligned}$$

其中  $\gamma_n = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t \rho_n(\tau) d\tau$ （相位  $\gamma_n$  早年间被认为可以舍去[19]，直到Berry提出一个反例[1]）。所以有

$$\begin{aligned}
 |\Psi(t)\rangle &= U(t) V(t) |\Psi''(t)\rangle \\
 &= \sum_{n,m} U(t) | \Phi_m[s_0] \rangle \langle \Phi_m[s_0] | V(t) e^{i\gamma_n(t)} | \Phi_n[s_0] \rangle \langle \Phi_n[s_0] | \Psi(0) \rangle, \\
 &= \sum_n | \Phi_n[s(t)] \rangle e^{i\phi_n(t)} e^{i\gamma_n(t)} \langle \Phi_n[s_0] | \Psi(0) \rangle
 \end{aligned} \quad (2.4)$$

(2.4)说明了初始状态下待在某个能级上的态会一直待在这个能级上，这个结论一般称为量子绝热定理[2]。

### 2.1.3 有简并

当系统存在兼并时，不能简单地将 $\Delta'(t)$ 的非对角项舍去，但对于处于不同能级的 $n, m$ ，仍可以认为 $\Delta'_{nm}$ 对系统时间演化没有贡献，所以可以取近似

$$\Delta'_{N\nu, M\mu} = \delta_{N, M} R_{\nu\mu}^{(N)}(t)$$

$R_{\nu\mu}^{(N)}(t)$ 是本征子空间中的转动矩阵

$$\begin{aligned} R_{\nu\mu}^{(N)}(t) &:= \Delta'_{N\nu, N\mu}(t) = \Delta_{N\nu, N\mu}(t) = i\hbar \left[ \left( \frac{d}{dt} U^\dagger(t) \right) U(t) \right]_{N\nu, M\mu} \\ &= i\hbar \left( \frac{d}{dt} \langle \Phi_{N\nu}[s(t)] | \right) | \Phi_{M\mu}[s(t)] \rangle \end{aligned}$$

所以由方程(2.3)类似地得到

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi''(t)\rangle &= \Delta'(t) |\Psi''(t)\rangle \\ \Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Phi_{N\nu}[s_0] | \Psi''(t) \rangle &= \sum_{\mu} R_{\nu\mu}^{(N)}(t) \langle \Phi_{N\mu}[s_0] | \Psi''(t) \rangle \end{aligned}$$

定义矩阵 $\Gamma^{(N)}(t)$ 为 $|\Psi''(t)\rangle$ 和 $|\Psi''(0)\rangle$ 间的“联系”

$$\langle \Phi_{N\nu}[s_0] | \Psi''(t) \rangle = \sum_{\mu} \Gamma_{\nu\mu}^{(N)}(t) \langle \Phi_{N\mu}[s_0] | \Psi''(0) \rangle,$$

$\Gamma^{(N)}(t)$ 称为Berry转动矩阵，由常微分方程(2.5)的解给出

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d\Gamma^{(N)}(t)}{dt} = R^{(N)}(t) \Gamma^{(N)}(t) \\ \Gamma^{(N)}(0) = \mathbb{1} \end{cases} \quad (2.5)$$

所以

$$\begin{aligned} |\Psi''(t)\rangle &= \sum_{N, \nu, \mu} |\Phi_{N\nu}[s_0]\rangle \Gamma_{\nu\mu}^{(N)}(t) \langle \Phi_{N\mu}[s_0] | \Psi(0) \rangle \\ \Rightarrow |\Psi(t)\rangle &= \sum_{M, \rho, N, \nu, \mu} \underbrace{U(t) |\Phi_{M\rho}[s_0]\rangle}_{|\Phi_{M\rho}[s(t)]\rangle} \underbrace{\langle \Phi_{M\rho}[s_0] | V(t) | \Phi_{N\nu}[s_0] \rangle}_{\delta_{MN} \delta_{\rho\nu} e^{i\phi_N(t)}} \Gamma_{\nu\mu}^{(N)}(t) \langle \Phi_{N\mu}[s_0] | \Psi(0) \rangle \\ &= \sum_{N, \nu, \mu} |\Phi_{N\nu}[s(t)]\rangle e^{i\phi_N(t)} \Gamma_{\nu\mu}^{(N)}(t) \langle \Phi_{N\mu}[s_0] | \Psi(0) \rangle \end{aligned} \quad (2.6)$$

其中用到了 $|\Psi''(0)\rangle = |\Psi(0)\rangle$ ，动力学相位 $\phi_N(t)$ 则由

$$i\hbar \frac{d}{dt} V_{N\nu, M\mu}(t) = \delta_{NM} E_N V_{N\nu, M\mu}(t) \Rightarrow \begin{cases} V_{N\nu, M\mu}(t) = \delta_{NM} \delta_{\nu\mu} e^{i\phi_N(t)} \\ \phi_N(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_N[s(\tau)] d\tau \end{cases}$$

给出。对比方程(2.4)可以发现，当有简并存在时，相位 $e^{i\gamma_n(t)}$ 由 $\Gamma^{(N)}(t)$ 取代，本征子空间内不同本征矢获得不同的相位。

下面先后讨论没有简并和有简并时的态演化。

## 2.2 Berry相

系统不存在简并时，态的演化由方程(2.4)给出

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n |\Phi_n[s(t)]\rangle e^{i\phi_n(t)} e^{i\gamma_n(t)} \langle \Phi_n[s_0] | \Psi(0) \rangle$$

其中 $\phi_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n[s(\tau)] d\tau$ ， $\gamma_n = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t \rho_n(\tau) d\tau$ ， $|\Phi_m[s(t)]\rangle = U(t) |\Phi_m[s_0]\rangle$ ，

$$\rho_n(t) = i\hbar \left[ \left( \frac{d}{dt} U^\dagger(t) \right) U(t) \right]_{nn} = i\hbar \left( \frac{d}{dt} \langle \Phi_n[s(t)] | \right) | \Phi_n[s(t)] \rangle.$$

相位 $\gamma_n$ 是纯粹几何的，只依赖哈密顿量的参数 $s$ 从 $s(0)$ 到达 $s(t)$ 的路径，而与路径的时间依赖性无关：

$$\begin{aligned}\gamma_n(t) &= -\frac{1}{\hbar} \int_0^t i \hbar \left( \frac{d}{dt} \langle \Phi_n[s(\tau)] | \right) | \Phi_n[s(\tau)] \rangle d\tau \\ &= -i \int_0^t \sum_i \left( \frac{\partial}{\partial s_i} \langle \Phi_n[s(\tau)] | \right) | \Phi_n[s(\tau)] \rangle s'_i(\tau) d\tau, \\ &= -i \int_{c(t)} \sum_i ds_i \left( \frac{\partial}{\partial s_i} \langle \Phi_n[s] | \right) | \Phi_n[s] \rangle\end{aligned}$$

其中 $c(t)$ 是 $s$ 从 $s(0)$ 到 $s(t)$ 的路径。

值得注意的是：相位 $\gamma_n(t)$ 本身并没有太大的物理意义，有物理意义的是 $\gamma_n(t)$ 的等价类。当给能量本征态联系上一个依赖 $s$ 的额外相位 $|\Phi_m[s]\rangle \rightarrow e^{i\alpha[s]} |\Phi_m[s]\rangle$ （这样的变换在物理中称为规范变换 (gauge transformation)，在这种变换下的不变性称为规范对称性或局域对称性[30]），系统态矢

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n |\Phi_n[s(t)]\rangle \langle \Phi_n[s(t)] | \Psi(t) \rangle$$

不会发生变化，但从(2.4)可以看出 $\gamma_n(t) \rightarrow \gamma_n(t) + \alpha[s(0)] - \alpha[s(t)]$ 。当 $\alpha[s(0)] = \alpha[s(t)]$ 时 $\gamma_n(t)$ 不会因为能量本征态的额外相位而发生变化（ $\gamma_n(t)$ 是规范无关的），这启发我们观察参数 $s$ 的闭合路径 $c$ 上的时间演化相位 $\gamma_n(t)$ ，由于这样的相位只依赖路径，将其记为 $\gamma_n[c]$ ，称为Berry相[1]。下面给出计算Berry相的方便公式和一个具体的例子。

$\gamma_n[c]$ 中的一重积分可以用Stokes定理改写为二重积分

$$\begin{aligned}\gamma_n[c] &= -i \oint_{c(t)} \sum_j ds_j \left( \frac{\partial}{\partial s_j} \langle \Phi_n[s] | \right) | \Phi_n[s] \rangle \\ &= -i \int_{A[c]} \sum_{i,j} ds_j \wedge ds_i \frac{\partial}{\partial s_i} \left[ \left( \frac{\partial}{\partial s_j} \langle \Phi_n[s] | \right) | \Phi_n[s] \rangle \right], \\ &= i \int_{A[c]} \sum_{i,j} ds_i \wedge ds_j \frac{\partial}{\partial s_i} \left[ \left( \frac{\partial}{\partial s_j} \langle \Phi_n[s] | \right) | \Phi_n[s] \rangle \right]\end{aligned}\tag{2.7}$$

$ds_i \wedge ds_j = -ds_j \wedge ds_i$ 是反对称的面元， $A[c]$ 是 $c$ 围成的区域。(2.7)中的 $\left( \frac{\partial}{\partial s_i} \langle \Phi_n[s] | \right) | \Phi_n[s] \rangle$ 有时被称为Berry联络(相差一个系数)， $\frac{\partial}{\partial s_i} \left[ \left( \frac{\partial}{\partial s_j} \langle \Phi_n[s] | \right) | \Phi_n[s] \rangle \right]$ 称为Berry曲率。

对于三维情形，即参数 $s$ 只有三个分量，Berry曲率作为一个反对称二阶张量可以对应到一个矢量，二重积分可以进一步简化

$$\gamma_n[c] = -i \int_{A[c]} dA \vec{e} \cdot \nabla \times \{ \nabla ( \langle \Phi_n[s] | ) | \Phi_n[s] \rangle \}.$$

$ds_i \wedge ds_j$ 的反对称性导致了 $ds_i \wedge ds_j \frac{\partial}{\partial s_i} \frac{\partial}{\partial s_j} \langle \Phi_n[s] | = 0$ ，所以

$$\begin{aligned}\gamma_n[c] &= i \int_{A[c]} \sum_{i,j} ds_i \wedge ds_j \left( \frac{\partial}{\partial s_i} \langle \Phi_n[s] | \right) \left( \frac{\partial}{\partial s_j} | \Phi_n[s] \rangle \right) \\ &= i \int_{A[c]} \sum_{i,j} ds_i \wedge ds_j \left( \frac{\partial}{\partial s_i} \langle \Phi_n[s] | \right) \sum_m | \Phi_m[s] \rangle \langle \Phi_m[s] | \left( \frac{\partial}{\partial s_j} | \Phi_n[s] \rangle \right), \\ &= i \int_{A[c]} \sum_{i,j} ds_i \wedge ds_j \sum_{m \neq n} \left( \frac{\partial}{\partial s_i} \langle \Phi_n[s] | \right) | \Phi_m[s] \rangle \langle \Phi_m[s] | \left( \frac{\partial}{\partial s_j} | \Phi_n[s] \rangle \right)\end{aligned}\tag{2.8}$$

其中用到了

$$\begin{aligned}& i \int_{A[c]} \sum_{i,j} ds_i \wedge ds_j \left( \frac{\partial}{\partial s_i} \langle \Phi_n[s] | \right) | \Phi_n[s] \rangle \langle \Phi_n[s] | \left( \frac{\partial}{\partial s_j} | \Phi_n[s] \rangle \right) \\ & \xrightarrow{\frac{\partial}{\partial s_j} \langle \Phi_n[s] | \Phi_n[s] \rangle = 0} -i \int_{A[c]} \sum_{i,j} ds_i \wedge ds_j \left( \frac{\partial}{\partial s_i} \langle \Phi_n[s] | \right) | \Phi_n[s] \rangle \left( \frac{\partial}{\partial s_j} \langle \Phi_n[s] | \right) | \Phi_n[s] \rangle \\ & = 0\end{aligned}$$

对能量本征方程求 $s_i$ 的导数

$$\begin{aligned}
H[s] |\Phi_n[s]\rangle &= E_n[s] |\Phi_n[s]\rangle \\
\stackrel{|\Phi_n\rangle := |\Phi_n[s]\rangle}{\Longrightarrow} &\left(\frac{\partial}{\partial s_i} H\right) |\Phi_n\rangle + H \left(\frac{\partial}{\partial s_i} |\Phi_n\rangle\right) = \left(\frac{\partial}{\partial s_i} E_n\right) |\Phi_n\rangle + E_n \left(\frac{\partial}{\partial s_i} |\Phi_n\rangle\right) \\
\stackrel{m \neq n}{\Longrightarrow} &\langle \Phi_m | \left(\frac{\partial}{\partial s_i} H\right) |\Phi_n\rangle + E_m \langle \Phi_m | \frac{\partial}{\partial s_i} |\Phi_n\rangle = E_n \langle \Phi_m | \frac{\partial}{\partial s_i} |\Phi_n\rangle \\
\Rightarrow &\begin{cases} \left(\frac{\partial}{\partial s_i} \langle \Phi_n | \right) |\Phi_m\rangle = \frac{1}{E_n - E_m} \left[ \langle \Phi_m | \left(\frac{\partial}{\partial s_i} H\right) |\Phi_n\rangle \right]^* \\ \langle \Phi_m | \frac{\partial}{\partial s_j} |\Phi_n\rangle = \frac{1}{E_n - E_m} \langle \Phi_m | \left(\frac{\partial}{\partial s_j} H\right) |\Phi_n\rangle \end{cases}
\end{aligned}$$

所以

$$\gamma_n[c] = i \int_{A[c]} \sum_{i,j} ds_i \wedge ds_j \sum_{m \neq n} \frac{1}{(E_n - E_m)^2} \left[ \langle \Phi_m | \left(\frac{\partial}{\partial s_i} H\right) |\Phi_n\rangle \right]^* \langle \Phi_m | \left(\frac{\partial}{\partial s_j} H\right) |\Phi_n\rangle, \quad (2.9)$$

从(2.9)可以看出 $\gamma_n[c]$ 不仅和 $|\Phi_n\rangle$ 的相位无关(规范无关), 和能量尺度也无关。

三维情形下

$$\begin{aligned}
ds_i \wedge ds_j &= \sum_k \varepsilon_{ijk} d\vec{A} \cdot \hat{x}_k = \sum_k \varepsilon_{ijk} dA e_k \\
\Rightarrow \gamma_n[c] &= i \int_{A[c]} \sum_{i,j,k} \varepsilon_{ijk} dA e_k \sum_{m \neq n} \frac{1}{(E_n - E_m)^2} \left[ \langle \Phi_m | \left(\frac{\partial}{\partial s_i} H\right) |\Phi_n\rangle \right]^* \langle \Phi_m | \left(\frac{\partial}{\partial s_j} H\right) |\Phi_n\rangle, \\
\Rightarrow \gamma_n[c] &= \int_{A[c]} dA \vec{e} \cdot \underbrace{\sum_{m \neq n} \frac{i}{(E_n - E_m)^2} [\langle \Phi_m | (\nabla_{\vec{s}} H) |\Phi_n\rangle]^* \times \langle \Phi_m | (\nabla_{\vec{s}} H) |\Phi_n\rangle}_{\vec{V}_n[s]}
\end{aligned} \quad (2.10)$$

其中 $e_k = \vec{e} \cdot \hat{x}_k$ ,  $\vec{e}$ 是面元 $dA$ 法向量。

### 2.2.1 例子：磁场中的角动量

现在来看一个具体的例子。磁场中的粒子因其在沿磁场方向上的不同角动量而具有不同的能量, 可以将哈密顿量写成与角动量无关的部分和角动量带来的额外部分

$$H[\vec{B}] = H_0 + \kappa \vec{B} \cdot \vec{J}, \quad [H_0, \vec{J}] = 0,$$

记 $\hat{B} \cdot \vec{J}$ 的本征态为 $|\Phi_n[\vec{B}]\rangle$ , 量子力学告诉我们[26]

$$\begin{cases} H_0 |\Phi_n[\vec{B}]\rangle = E_0 |\Phi_n[\vec{B}]\rangle \\ \hat{B} \cdot \vec{J} |\Phi_n[\vec{B}]\rangle = n \hbar |\Phi_n[\vec{B}]\rangle \\ \vec{J}^2 |\Phi_n[\vec{B}]\rangle = j(j+1) \hbar^2 |\Phi_n[\vec{B}]\rangle \end{cases} \Rightarrow E_n[\vec{B}] = E_0 + \kappa |\vec{B}| n \hbar$$

在绝热近似的背景下, (2.10)中的 $\vec{V}_n[s]$ 可以写为

$$\begin{aligned}
\vec{V}_n[\vec{B}] &= \sum_{m \neq n} \frac{i}{(E_n - E_m)^2} [\langle \Phi_m | (\nabla_{\vec{B}} H) |\Phi_n\rangle]^* \times \langle \Phi_m | (\nabla_{\vec{B}} H) |\Phi_n\rangle \\
&= \sum_{m \neq n} \frac{i}{|\vec{B}|^2 \hbar^2 (n-m)^2} [\langle \Phi_m | \vec{J} |\Phi_n\rangle]^* \times \langle \Phi_m | \vec{J} |\Phi_n\rangle,
\end{aligned}$$

$\vec{e} \cdot \vec{V}[\vec{B}]$ 不依赖坐标轴的选取, 让 $z$ -轴沿着 $\vec{B}$ 的方向,  $\langle \Phi_m | J_3 | \Phi_n \rangle = 0$ , 所以 $\vec{V}_n[s]$ 只有沿着 $z$ -轴的分量

$$\vec{V}_n[\vec{B}] = \frac{i \hat{z}}{\hbar^2 |\vec{B}|^2} \sum_{\pm} [\langle \Phi_{n\pm 1} | J_1 | \Phi_n \rangle^* \langle \Phi_{n\pm 1} | J_2 | \Phi_n \rangle - \langle \Phi_{n\pm 1} | J_2 | \Phi_n \rangle^* \langle \Phi_{n\pm 1} | J_1 | \Phi_n \rangle],$$

用升降算符替换笛卡尔基下的角动量算符  $J_{\pm} = J_1 \pm i J_2$ ,  $J_1 = \frac{1}{2}(J_+ + J_-)$ ,  $J_2 = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$

$$\begin{cases} \langle \Phi_{n\pm 1} | J_1 | \Phi_n \rangle^* \langle \Phi_{n\pm 1} | J_2 | \Phi_n \rangle = \frac{1}{4i} (\langle J_+ \rangle^* \langle J_+ \rangle - \langle J_- \rangle^* \langle J_- \rangle) \\ \langle \Phi_{n\pm 1} | J_2 | \Phi_n \rangle^* \langle \Phi_{n\pm 1} | J_1 | \Phi_n \rangle = \frac{1}{4i} (\langle J_- \rangle^* \langle J_- \rangle - \langle J_+ \rangle^* \langle J_+ \rangle) \end{cases},$$

其中  $\langle J_+ \rangle := \langle \Phi_{n\pm 1} | J_+ | \Phi_n \rangle$ ,  $\langle J_- \rangle := \langle \Phi_{n\pm 1} | J_- | \Phi_n \rangle$ , 将其代入得到

$$\begin{aligned} & \begin{cases} \langle \Phi_{n+1} | J_+ | \Phi_n \rangle = \hbar \sqrt{(j+n+1)(j-n)} \\ \langle \Phi_{n-1} | J_- | \Phi_n \rangle = \hbar \sqrt{(j-n+1)(j+n)} \end{cases} \\ \Rightarrow \vec{V}_n[\vec{B}] &= \frac{\hat{z}}{2\hbar^2 |\vec{B}|^2} \hbar^2 [(j+n+1)(j-n) - (j-n+1)(j+n)] \\ &= -\frac{n\hat{z}}{|\vec{B}|^2} \end{aligned}$$

将  $\vec{V}_n[\vec{B}]$  中的  $\hat{z}$  改为  $\vec{B}$  得到

$$\gamma_n[c] = - \int_{A[c]} dA \vec{e} \cdot \frac{n\vec{B}}{|\vec{B}|^3},$$

这个积分可以由  $\vec{B}$  空间中的 Gauss 定理给出, 将回路  $A[c]$  的边缘与  $\vec{B} = 0$  连成一个锥体,  $A[c]$  围成的区域内的面积分等于整个锥体表面上的积分, 记锥体围成的体积为  $V[c]$ , 那么

$$\gamma_n[c] = -n \int_{V[c]} dV \nabla \cdot \frac{\vec{B}}{|\vec{B}|^3}.$$

静电学的知识也告诉我们这个积分正比与  $A[c]$  对应的立体角  $\Omega[c]$

$$\gamma_n[c] = -n \Omega[c],$$

如果  $\vec{B}$  绕  $z$  轴旋转的话,  $|\vec{B}|$  和  $B_3$  不变, 此时可以显式地写下  $\gamma_n[c]$

$$\gamma_n[c] = -n \int_0^{\arccos(B_3/|\vec{B}|)} 2\pi \sin \theta d\theta = -2\pi n \left(1 - \frac{B_3}{|\vec{B}|}\right).$$

Berry 相或类似 Berry 相的相位在物理学中经常出现, Wilczek 在其《物理学中的几何相位》[31] 一书中有具体的讨论。

## 2.3 非阿贝尔 Berry 相

“阿贝尔”在数学中一般出现在“阿贝尔群”这样的词汇中, 强调群运算的交换性, 用来纪念挪威数学家 Niels Henrik Abel[9]。物理学文献中的“阿贝尔”则因出现的场景不同而有细微的差别, 但大抵也是用来表达某种“交换性”。例如“非阿贝尔规范场”中的“非阿贝尔”指对称性群的非交换性, “非阿贝尔 Berry 相”中的“非阿贝尔”则是指几何相位的非交换性。

2.1.3 中我们已经见过: 当有简并存在时, 复值相位  $e^{i\gamma_n(t)}$  由矩阵值  $\Gamma^{(N)}(t)$  取代, 矩阵的乘积不可交换, 这是“非阿贝尔”一词的来源。

系统存在简并时, 态的演化由(2.6)给出

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{N,\nu,\mu} |\Phi_{N\nu}[s(t)]\rangle e^{i\phi_N(t)} \Gamma_{\nu\mu}^{(N)}(t) \langle \Phi_{N\mu}[s_0] | \Psi(0) \rangle,$$

其中  $\phi_N(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_N[s(\tau)] d\tau$ , 矩阵  $\Gamma^{(N)}(t)$  满足方程

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d\Gamma_{\mu\nu}^{(N)}(t)}{dt} = \sum_{\rho} R_{\mu\rho}^{(N)}(t) \Gamma_{\rho\nu}^{(N)}(t) \\ \Gamma_{\mu\nu}^{(N)}(0) = \delta_{\mu\nu} \\ R_{\mu\nu}^{(N)}(t) = i\hbar \left( \frac{d}{dt} \langle \Phi_{N\mu}[s(t)] | \Phi_{N\nu}[s(t)] \rangle \right) \end{cases},$$

为了清楚地表达对参数 $s$ 的依赖，现在用Berry联络 $A_{\mu\nu}^{j;(N)}[s] = i \langle \Phi_{N\mu}[s] | \frac{\partial}{\partial s_j} | \Phi_{N\nu}[s] \rangle$ 改写这个方程，同时为使记号尽可能简洁，现在开始忽略上指标 $N$

$$\begin{cases} \frac{d\Gamma_{\mu\nu}(t)}{dt} = i \sum_j \dot{s}_j \cdot \sum_\rho A_{\mu\rho}^j[s] \Gamma_{\rho\nu}(t), \\ \Gamma_{\mu\nu}(0) = \delta_{\mu\nu} \end{cases}, \quad (2.11)$$

类似无简并的情形，(2.11)给出的解依赖参数从 $s_0$ 抵达 $s(t)$ 的路径 $c(t)$

$$d\Gamma_{\mu\nu}(t) = i \sum_j ds_j(t) \sum_\rho A_{\mu\rho}^j[s(t)] \Gamma_{\rho\nu}(t),$$

或者作为矩阵

$$d\Gamma(t) = i \sum_j ds_j(t) A^j[s(t)] \Gamma(t).$$

值得一提的是， $\Gamma(t)$ 满足的方程类似含时且不同时刻互不对易的哈密顿量给出的时间演化算符满足的微分方程

$$i \hbar U(t) = H(t) U(t),$$

现代粒子物理中发展的很多技术所要处理的核心问题就是这个时间演化算符的求解，所以可以猜到非阿贝尔Berry相中的Berry转动矩阵 $\Gamma(t)$ 大部分情况下没有简单的计算方法，更何况 $\Gamma(t)$ 不仅依赖时间，还依赖路径。

类似时间演化算符的形式结果[24]

$$U(t, t_0) = T e^{i \int_{t_0}^t H(\tau) d\tau},$$

其中 $T$ 是时序符号，用来后面各算符按照时间顺序排列；而指数函数则是其定义 $e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$ ，我们也可以给出转动矩阵的形式解

$$\Gamma(t) = P e^{i \int_{s_0}^{s(t)} \sum_j ds_j A^j[s]}, \Gamma(0) = \mathbb{1} \quad (2.12)$$

其中 $P$ 是路径序符号，用来后面各算符按照时间顺序排列。这个结果一般用来进行数值计算(2.3.3)。

下面来讨论Berry转动矩阵和Berry曲率的规范协变性。

### 2.3.1 规范协变性

在讨论之前，需要先明确一些定义。(2.7)中我们曾给出阿贝尔情形下Berry联络 $A^i[s]$ 和Berry曲率 $F^{ij}[s]$ 的定义：

$$\begin{aligned} \gamma_n[c] &= \oint_{c(t)} \sum_k ds_k \underbrace{i \langle \Phi_n[s] | \left( \frac{\partial}{\partial s_k} | \Phi_n[s] \rangle \right)}_{A^k[s]} \\ &= - \int_{A[c]} \sum_{j,k} ds_j \wedge ds_k \underbrace{i \frac{\partial}{\partial s_j} \left[ \langle \Phi_n[s] | \left( \frac{\partial}{\partial s_k} | \Phi_n[s] \rangle \right) \right]}_{F^{jk}[s]}, \end{aligned}$$

非阿贝尔的Berry联络变成矩阵值的向量

$$\Gamma[c] = P e^{i \oint \sum_j ds_j A^j[s]},$$

但由于这里的回路积分并不是一个真正的积分，所以不能简单地用Stokes定理定义Berry曲率。

一种思路是看参数空间中一点邻域的环路，在充分小的区域内可以认为算符 $A^j[s]$ 不变，交换性使得Stokes定理有效。

当回路 $c$ 足够小且在 $s$ 附近时，可以认为 $\Gamma[c]$ 只依赖 $s$ ，将其记为 $\Gamma(s)$

$$\begin{aligned} \Gamma(s) &= P e^{i \oint \sum_j ds_j A^j[s]} \\ &\cong e^{i \oint \sum_j ds_j A^j[s]} \\ &= e^{-i \sum_{j,k} ds_j \wedge ds_k \tilde{F}^{jk}[s]} \end{aligned}$$



其中  $\tilde{F}^{jk}[s] = \frac{\partial}{\partial s_j} A^k$ 。值得注意的是,  $\tilde{F}^{jk}[s]$  可能并不满足规范协变性, 而和真正规范协变的Berry曲率  $F^{jk}[s]$  相差一个对称张量  $S^{jk} = S^{jk}$ , 这一项对  $\Gamma(t)$  没有贡献。

下面来证明Berry转动矩阵  $\Gamma[c]$  的规范协变性, 并推导出满足规范协变性的Berry曲率  $F^{jk}[s]$ 。  
考虑一个规范变换

$$|\tilde{\Phi}_{N\mu}[s]\rangle = \sum_{\rho} |\Phi_{N\rho}[s]\rangle U_{\rho\mu}[s],$$

$U$  是幺正矩阵  $UU^\dagger = \mathbb{1}$ , 对偶基变换的是  $\langle\tilde{\Phi}_{N\mu}[s]| = \sum_{\rho} U_{\mu\rho}^\dagger[s] \langle\Phi_{N\rho}[s]|$ 。Berry联络变为

$$\begin{aligned}\tilde{A}_{\mu\nu}^k[s] &= i \langle\tilde{\Phi}_{N\mu}[s]| \frac{\partial}{\partial s_k} |\tilde{\Phi}_{N\nu}[s]\rangle \\ &= U_{\mu\rho}^\dagger A_{\rho\gamma}^k U_{\gamma\nu} + i U_{\mu\rho}^\dagger \frac{\partial}{\partial s_k} U_{\rho\nu},\end{aligned}$$

或者

$$\tilde{A}^k[s] = U^\dagger A^k U + i U^\dagger \frac{\partial}{\partial s_k} U.$$

此时  $ds$  对应的Berry转动矩阵

$$\begin{aligned}e^{i\sum_j ds_j \cdot \tilde{A}^j} &\cong 1 + i \sum_j ds_j \tilde{A}^j \\ &= 1 + i \sum_j ds_j U^\dagger A^j U - \sum_j ds_j U^\dagger \frac{\partial}{\partial s_j} U, \\ &\cong U^\dagger \left( 1 + i \sum_j ds_j A^j \right) \left( 1 - \sum_j ds_j \frac{\partial}{\partial s_j} \right) U \\ &\cong U^\dagger[s] e^{i\sum_j ds_j A^j} U[s - ds]\end{aligned}$$

经过一个闭合回路后

$$\tilde{\Gamma}[c] = U^\dagger[s_0] \Gamma[c] U[s_0], \quad (2.13)$$

(2.13) 称为非阿贝尔Berry转动矩阵的规范协变性。

Berry曲率的规范协变性则稍复杂些。首先在  $s$  附近的回路上计算  $\Gamma(t)$

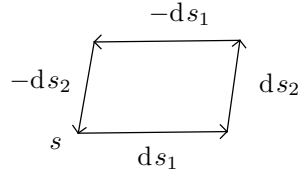


图 2.1. 参数空间  $s$  附近的小回路

$$\Gamma[s] = \Gamma[c] = \Gamma(s, s + ds_2) \Gamma(s + ds_2, s + ds_1 + ds_2) \Gamma(s + ds_1 + ds_2, s + ds_1) \Gamma(s + ds_1, s),$$

前两项写成  $\Gamma^{-1}(s + ds_2, s) \Gamma^{-1}(s + ds_1 + ds_2, s + ds_2)$  的形式更容易计算[3]。

Baker-Hausdorff公式[7]可以帮助计算这个算符乘积

$$e^X e^Y = e^Z, Z = X + Y + \frac{1}{2}[X, Y] + \frac{1}{12}[X, [X, Y]] - \frac{1}{12}[Y, [X, Y]] + \dots,$$

令  $X = \epsilon A, Y = \epsilon B, \epsilon \ll 1$ , 取近似

$$\begin{aligned}e^{\epsilon A} e^{\epsilon B} &= e^{\epsilon(A+B) + \frac{\epsilon^2}{2}[A, B]} + O(\epsilon^3), \\ &\cong e^{\epsilon(A+B) + \frac{\epsilon^2}{2}[A, B]},\end{aligned}$$

可以得到

$$\begin{aligned} & \Gamma(s + ds_1 + ds_2, s + ds_1) \Gamma(s + ds_1, s) \\ &= e^{iA^j(s+ds_1)ds_{2j}} e^{iA^k(s)ds_{1k}} \\ &\cong \exp\left(i(A^k ds_{1k} + A^j ds_{2j} + \partial^k A^j ds_{1k} ds_{2j}) - \frac{1}{2}[A^j, A^k] ds_{1k} ds_{2j}\right), \end{aligned}$$

类似地

$$\begin{aligned} & \Gamma^{-1}(s + ds_2, s) \Gamma^{-1}(s + ds_1 + ds_2, s + ds_2) \\ &= e^{-iA^j(s)ds_{2j}} e^{-iA^k(s+ds_2)ds_{1k}} \\ &\cong \exp\left(-i(A^k ds_{1k} + A^j ds_{2j} + \partial^j A^k ds_{1k} ds_{2j}) - \frac{1}{2}[A^j, A^k] ds_{1k} ds_{2j}\right), \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} \Gamma[s] &\cong \exp(i\partial^k A^j ds_{1k} ds_{2j} - i\partial^j A^k ds_{1k} ds_{2j} - [A^j, A^k] ds_{1k} ds_{2j}) \\ &= \exp\left[\underbrace{i(\partial^k A^j - \partial^j A^k - i[A^k, A^j])}_{F^{kj}} ds_{1k} ds_{2j}\right]. \end{aligned}$$

可以验证,  $F^{kj} = \partial^k A^j - \partial^j A^k - i[A^k, A^j]$  是满足规范协变性的Berry曲率

$$\begin{aligned} |\Phi_{N\mu}[s]\rangle &\rightarrow |\tilde{\Phi}_{N\mu}[s]\rangle = \sum_{\rho} |\Phi_{N\rho}[s]\rangle U_{\rho\mu}[s] \\ \Rightarrow A^k &\rightarrow \tilde{A}^k = U^\dagger A^k U + iU^\dagger \frac{\partial}{\partial s_k} U \\ \Rightarrow F^{kj} &\rightarrow \tilde{F}^{kj} = U^\dagger F^{kj} U \end{aligned}$$

其中只需要用到  $(\partial^k U) U^\dagger = -U (\partial^k U^\dagger)$ 。

### 2.3.2 例子：核四极矩的磁共振

非阿贝尔Berry相会造成核四极矩的能级排布[33]。原子核四极矩与磁场间的相互作用哈密顿量是

$$H = (\vec{B} \cdot \vec{J})^2 = B^2 (J_x \cos\theta \cos\phi + J_y \cos\theta \sin\phi + J_z \sin\theta)^2, \quad (2.14)$$

其中  $\vec{J}$  是自旋  $j$  的角动量算符。本征能量是

$$H |\hat{B}, \pm m\rangle = (mB)^2 |\hat{B}, \pm m\rangle, m = -j, \dots, j.$$

泡利矩阵满足  $\sigma_\alpha^2 = \mathbb{1}, \sigma_\alpha \sigma_\beta + \sigma_\beta \sigma_\alpha = 0, \alpha, \beta \in \{x, y, z\}$ , 因此角动量  $j \geq 1$  时才会有非平凡的哈密顿量。以  $j = 3/2$  为例, 此时有

$$\begin{aligned} J_x &= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3}/2 & 0 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & 0 \end{pmatrix}, \\ J_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{3}/2 & 0 & 0 \\ i\sqrt{3}/2 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i\sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & i\sqrt{3}/2 & 0 \end{pmatrix}, \\ J_z &= \begin{pmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

哈密顿量的谱由两个二重简并的能级组成。

当  $\vec{B}$  在球坐标中的指向为  $(\theta, \phi)$  时(图2.2)

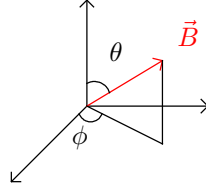


图 2.2. 磁场  $\vec{B}$  方向

能量本征态为

$$\begin{aligned} |\hat{B}, m\rangle &= U_z(\phi) U_y(\theta) |m\rangle \\ &= e^{-iJ_z\phi} e^{-iJ_y\theta} |m\rangle, \end{aligned} \quad (2.15)$$

Berry联络可以在球坐标下计算

$$\begin{aligned} \vec{A}_{mm'} &= i \left\langle \hat{B}, m \left| \frac{\partial}{\partial \vec{B}} \right| \hat{B}, m' \right\rangle \\ &= \frac{i}{B} \left\langle m \left| U_y^\dagger(\theta) U_z^\dagger(\phi) \left( \hat{e}_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{e}_\phi \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) U_z(\phi) U_y(\theta) \right| m' \right\rangle, \\ &= \frac{i}{B} \left\langle m \left| e^{iJ_y\theta} e^{iJ_z\phi} \left( \hat{e}_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{e}_\phi \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) e^{-iJ_z\phi} e^{-iJ_y\theta} \right| m' \right\rangle \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} e^{iJ_y\theta} e^{iJ_z\phi} i \frac{\partial}{\partial \theta} e^{-iJ_z\phi} e^{-iJ_y\theta} &= J_y \\ e^{iJ_y\theta} e^{iJ_z\phi} i \frac{\partial}{\partial \phi} e^{-iJ_z\phi} e^{-iJ_y\theta} &= e^{iJ_y\theta} J_z e^{-iJ_y\theta} \underline{\underline{\text{rotation}}} - \sin \theta J_x + \cos \theta J_z, \end{aligned}$$

其中第二式也可以直接计算

$$\begin{cases} f(\theta) = e^{iJ_y\theta} J_z e^{-iJ_y\theta} \\ \frac{df}{d\theta} = e^{iJ_y\theta} (-J_x) e^{-iJ_y\theta} \\ \frac{d^2 f}{d\theta^2} = e^{iJ_y\theta} (-J_z) e^{-iJ_y\theta} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{d^{2k+1} f}{d\theta^{2k+1}} = (-1)^{k+1} e^{iJ_y\theta} J_x e^{-iJ_y\theta} \\ \frac{d^{2k} f}{d\theta^{2k}} = (-1)^k e^{iJ_y\theta} J_z e^{-iJ_y\theta} \end{cases},$$

这样就能得到

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\theta^k}{k!} \frac{d^k f}{d\theta^k}(0) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\theta^{2k}}{(2k)!} \frac{d^{2k} f}{d\theta^{2k}}(0) + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\theta^{2k+1}}{(2k+1)!} \frac{d^{2k+1} f}{d\theta^{2k+1}}(0) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\theta^{2k}}{(2k)!} (-1)^k J_z + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\theta^{2k+1}}{(2k+1)!} (-1)^{k+1} J_x \\ &= \cos \theta J_z - \sin \theta J_x \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} \vec{A} &= \hat{e}_\theta A^\theta + \hat{e}_\phi A^\phi \\ A^\theta &= \frac{1}{B} J_y, A^\phi = \frac{1}{B \sin \theta} (-\sin \theta J_x + \cos \theta J_z). \end{aligned}$$

这里有两个问题：一个是  $A_\phi$  在  $\theta = 0, \pi$  处会发散；另一个是：态  $|\hat{B}, m\rangle = e^{-iJ_z\phi} e^{-iJ_y\theta} |m\rangle$  不是单值的， $\phi \rightarrow \phi + 2\pi$  不会引起物理系统的变化，但态却改变了。消除困难的一种可能办法是加上一个相反的项以消除  $\phi$  中可能存在的相位

$$\begin{aligned} |\hat{B}, m\rangle &= U_z(\phi) U_y(\theta) U(-\phi) |m\rangle \\ &= e^{-iJ_z\phi} e^{-iJ_y\theta} e^{iJ_z\phi} |m\rangle. \end{aligned} \quad (2.16)$$

用新的基得到的 $A_\theta$ 和 $A_\phi$ 分别为

$$A^\theta = \frac{1}{B} \begin{pmatrix} 0 & \frac{-i\sqrt{3}}{2} e^{-i\phi} & 0 & 0 \\ \frac{i\sqrt{3}}{2} e^{i\phi} & 0 & -i e^{-i\phi} & 0 \\ 0 & i e^{i\phi} & 0 & \frac{-i\sqrt{3}}{2} e^{-i\phi} \\ 0 & 0 & \frac{i\sqrt{3}}{2} e^{i\phi} & 0 \end{pmatrix},$$

$$A^\phi = \frac{1}{B \sin \theta} \begin{pmatrix} \frac{3}{2} (\cos \theta - 1) & -\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta e^{-i\phi} & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta e^{i\phi} & \frac{1}{2} (\cos \theta - 1) & -\sin \theta e^{-i\phi} & 0 \\ 0 & -\sin \theta e^{i\phi} & -\frac{1}{2} (\cos \theta - 1) & -\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta e^{-i\phi} \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta e^{i\phi} & -\frac{3}{2} (\cos \theta - 1) \end{pmatrix},$$

这样 $|\hat{B}, m\rangle$ 不再是多值的，而且 $\theta=0$ 也不再发散了（但 $\theta=\pi$ 处仍然有奇异性）。

记 $P_{3/2}$ 为向 $|m|=3/2$ 的简并子空间投影的投影算符

$$P_{3/2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$|m|=3/2$ 对应的简并能级的Berry联络是阿贝尔的（对角矩阵），这里仅写出 $|m|=3/2$ 对应子空间的部分

$$\begin{aligned} \vec{A}^{(3/2)} &= P_{3/2} \vec{A} P_{3/2} \\ &= \frac{\hat{e}_\phi}{B \sin \theta} \begin{pmatrix} \frac{3}{2} (\cos \theta - 1) & 0 \\ 0 & -\frac{3}{2} (\cos \theta - 1) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$|m|=1/2$ 对应的Berry联络则不是阿贝尔的（非对角矩阵）

$$\begin{aligned} \vec{A}^{(1/2)} &= P_{1/2} \vec{A} P_{1/2} \\ &= \frac{\hat{e}_\theta}{B} \begin{pmatrix} 0 & -i e^{-i\phi} \\ i e^{i\phi} & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hat{e}_\phi}{B \sin \theta} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} (\cos \theta - 1) & -\sin \theta e^{-i\phi} \\ -\sin \theta e^{i\phi} & -\frac{1}{2} (\cos \theta - 1) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Berry曲率可以用(2.17)计算

$$\begin{aligned} &\nabla \times (A^r \hat{e}_r + A^\theta \hat{e}_\theta + A^\phi \hat{e}_\phi) \\ &= \frac{\hat{e}_r}{r \sin \theta} \left[ \frac{\partial (A^\phi \sin \theta)}{\partial \theta} - \frac{\partial A^\theta}{\partial \phi} \right] + \frac{\hat{e}_\theta}{r} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial A^r}{\partial \phi} - \frac{\partial (r A^\phi)}{\partial r} \right] + \frac{\hat{e}_\phi}{r} \left[ \frac{\partial (r A^\theta)}{\partial r} - \frac{\partial A^r}{\partial \theta} \right], \end{aligned} \quad (2.17)$$

$F^{jl} (j, l \in \{r, \theta, \phi\})$ 的唯一非零分量是 $F^{\theta\phi}$ （或者 $F^{\phi\theta}$ ，二者相差一个负号）

$$\begin{aligned} F^{\theta\phi;(3/2)} &= (\nabla \times \vec{A}^{(3/2)})^r - i [A^{\theta;(3/2)}, A^{\phi;(3/2)}] \\ &= -\frac{3}{2B^2} \sigma_3 \\ F^{\theta\phi;(1/2)} &= \frac{3}{2B^2} \sigma_3 \end{aligned},$$

Berry曲率对于(2.15)和(2.16)有着同样的形式，这个结果惊人得简洁。

Berry相导致了核四极矩的能谱变化，具体的谱线分裂在实验中已经得到了证实[22]。近期探测非阿贝尔Berry相的尝试则可以在[14]中找到。

另外，核四极矩的耦合哈密顿量与半导体中 $\mathbf{k}=0$ 附近的重空穴（ $m=\pm 3/2$ ）和轻空穴（ $m=\pm 1/2$ ）的有效哈密顿量类似（图2.3）。忽略各向异性，在 four-band 近似下，four-band Luttinger 哈密顿量[32]可以写为

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( \gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) k^2 - 2\gamma_2 (\vec{k} \cdot \vec{J})^2 \right],$$

其中 $\gamma_{1,2}$ 是依赖材料的参数。第一项常数对Berry联络和Berry曲率没有影响，第二项与(2.14)有着相同的形式，只是 $\vec{B}$ 被 $\vec{k}$ 取代了，所以这个体系有着与核四极矩振荡问题中完全一样的Berry联络和Berry曲率[17]。

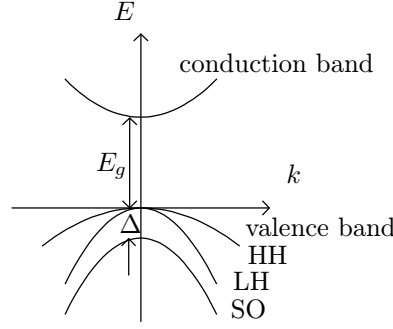


图 2.3.

### 2.3.3 Berry相的数值计算

式(2.12)能够给出Berry转动矩阵的数值算法：

将闭合回路 $c$ 切割成 $N$ 段，端点分别是 $s_0, \dots, s_{N-1}$ ， $s_N = s_0$ 。对于每一段，有

$$\begin{aligned} [e^{i \int \vec{s} \cdot \vec{A}[s_k]}]_{\alpha\beta} &\cong \delta_{\alpha\beta} + i \int \vec{s} \cdot \vec{A}_{\alpha\beta}[s_k] \\ &= \langle \Phi_{N\alpha}[s_k] | \Phi_{N\beta}[s_k] \rangle - \int \vec{s} \cdot \langle \Phi_{N\alpha}[s_k] | \nabla_s | \Phi_{N\beta}[s_k] \rangle \\ &= \langle \Phi_{N\alpha}[s_k] | \Phi_{N\beta}[s_k] \rangle + \int \vec{s} \cdot \nabla_s (\langle \Phi_{N\alpha}[s_k] | | \Phi_{N\beta}[s_k] \rangle) \\ &\cong \langle \Phi_{N\alpha}[s_{k+1}] | \Phi_{N\beta}[s_k] \rangle \end{aligned}$$

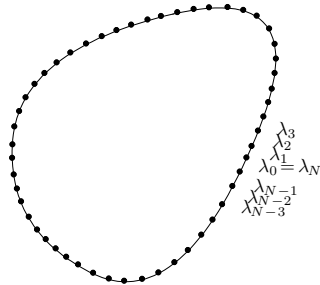


图 2.4. 参数空间闭合回路的离散化

所以

$$\Gamma_{\alpha\beta}[c] = \sum_{\beta_{N-1}, \dots, \beta_1} \langle \Phi_{N\alpha}[s_0] | \Phi_{N\beta_{N-1}}[s_{N-1}] \rangle \cdots \langle \Phi_{N\beta_2}[s_2] | \Phi_{N\beta_1}[s_1] \rangle \langle \Phi_{N\beta_1}[s_1] | \Phi_{N\beta}[s_0] \rangle,$$

或者写成矩阵形式

$$\Gamma[c] = M_{N-1} \cdots M_1 M_0,$$

其中 $(M_k)_{\alpha\beta} = \langle \Phi_{N\alpha}[s_{k+1}] | \Phi_{N\beta}[s_k] \rangle$ 。选择一组基，再计算出所有局域的 $M_k$ 就能得到回路上的Berry转动矩阵 $\Gamma[c]$ 。

### 3 致谢

这篇文章是用GNU  $\text{T}_{\text{E}}\text{X}_{\text{MACS}}$ [10]写成的，如果没有 $\text{T}_{\text{E}}\text{X}_{\text{MACS}}$ ，公式输入、图片绘制以及复杂的排版将会是一场噩梦。

感谢渔夫老师在过去一段时间里对我的指导、关心和照顾。

感谢学校提供的居住和自习环境。

感谢父母给予的支持。

### 参考文献

- [1] Berry Michael. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes[J]. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 392(1802):45–57, 1984.
- [2] Born Max, Fock Vladimir. Beweis des adiabatischenatzes[J]. *Zeitschrift für Physik*, 51(3-4):165–180, 1928.
- [3] Cheng Ta-Pei, Li Ling-Fong. *Gauge theory of elementary particle physics*[M]. Oxford University Press, USA, 2000:235–240.
- [4] Deligne Pierre, Etingof Pavel, et. al. *Quantum fields and strings: A course for mathematicians*[M], volume 2. American Mathematical Society, 1 edition, 1999.
- [5] Dyson Freeman. The S matrix in quantum electrodynamics[J]. *Physical Review*, 75(11):1736, 1949.
- [6] Galitskii V. M., Migdal A. B. Application of quantum field theory methods to the many body problem[J]. *Sov. Phys. JETP*, 7(96):18, 1958.
- [7] Hall Brian. *Lie Groups, Lie Algebras, and Representations: An Elementary Introduction*[M]. Springer International Publishing, 2 edition, 2015:110–111.
- [8] Hestenes D., Sobczyk Garret. *Clifford Algebra to Geometric Calculus: A Unified Language for Mathematics and Physics*[M]. Fundamental Theories of Physics. Springer, 1987.
- [9] Jacobson Nathan. *Basic Algebra I*[M]. Dover Publications, 2 edition, 2009.
- [10] Joris van der Hoeven, et. al. GNU TeXmacs[CP/OL]. <https://texmacs.org>, 1998.
- [11] Koltun Daniel S. Total binding energies of nuclei, and particle-removal experiments[J]. *Physical Review Letters*, 28(3):182, 1972.
- [12] Koltun Daniel S. Theory of mean removal energies for single particles in nuclei[J]. *Physical Review C*, 9(2):484, 1974.
- [13] Lehmann Harry. Über Eigenschaften von Ausbreitungsfunktionen und Renormierungskonstanten quantisierter Felder[J]. *Il Nuovo Cimento*, 11(4):342–357, apr 1954.
- [14] Li Tracy, Duca Lucia, et. al. Bloch state tomography using wilson lines[J]. *Science*, 352(6289):1094–1097, 2016.
- [15] Marchuk NG. Tensor products of clifford algebras[J]. *Doklady Mathematics*, 87(2):185–188, 2013.
- [16] Martin Paul C., Schwinger Julian. Theory of many-particle systems I[J]. *Phys. Rev.*, 115:1342–1373, Sep 1959.
- [17] Murakami Shuichi, Nagaosa Naoto, Zhang Shou-Cheng. Dissipationless quantum spin current at room temperature[J]. *Science*, 301(5638):1348–1351, 2003.
- [18] NLab authors. Majorana spinor[EB/OL]. <http://ncatlab.org/nlab/show/Majorana%20spinor>, may 2021. Revision 31.
- [19] Schiff Leonard. *Quantum Mechanics*[M]. McGraw-Hill Book Company, Inc., 3 edition, 1968:279–298.
- [20] Schwinger Julian. On the Green's Functions of Quantized Fields. I[J]. *Proceedings of the National Academy of Science*, 37(7):452–455, jul 1951.
- [21] Solem J. C., Biedenharn L. C. Understanding geometrical phases in quantum mechanics: An elementary example[J]. *Foundations of Physics*, 23(2):185–195, feb 1993.
- [22] Tycko Robert. Adiabatic rotational splittings and berry's phase in nuclear quadrupole resonance[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 58:2281–2284, Jun 1987.
- [23] Weinberg Steven. *The Quantum Theory of Fields: Vol. 1 Foundations*[M]. Cambridge University Press, 1994:107–108.
- [24] Weinberg Steven. *The Quantum Theory of Fields: Vol. 1 Foundations*[M]. Cambridge University Press, 1994:141–147.
- [25] Weinberg Steven. *The Quantum Theory of Fields: Vol. 1 Foundations*[M]. 1994:291–293.
- [26] Weinberg Steven. *Lectures on Quantum Mechanics*[M]. Cambridge University Press, 2 edition, 2015:112–117.
- [27] Weinberg Steven. *Lectures on Quantum Mechanics*[M]. Cambridge University Press, 2 edition, 2015:224–227.
- [28] Wikipedia contributors. Clifford algebra — Wikipedia, the free encyclopedia[EB/OL]. 2021. [Online; accessed 6-May-2021].
- [29] Wikipedia contributors. Fock space — Wikipedia, the free encyclopedia[EB/OL]. 2021. [Online; accessed 16-April-2021].

- [30] Wikipedia contributors. Gauge theory — Wikipedia, the free encyclopedia[EB/OL]. 2021. [Online; accessed 6-May-2021].
- [31] Wilczek Frank, Shapere Alfred. *Geometric phases in physics*[M]. World Scientific, 1989.
- [32] Winkler Roland. *Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*[M]. 2003.
- [33] Zee A. Non-abelian gauge structure in nuclear quadrupole resonance[J]. *Phys. Rev. A*, 38:1–6, Jul 1988.