

绝热演化中一般量子态的几何相位

吴 飙[†]

(中国科学院物理研究所 100080 北京)

刘 杰

(北京应用物理和计算数学研究所 100088 北京)

摘 要 在绝热演化中的几何相位(即 Berry 相位)被推广到包括非本征态的一般量子态. 这个新的几何相位同时适用于线性量子系统和非线性量子系统. 它对于后者尤其重要因为非线性量子系统的绝热演化不能通过本征态的线性叠加来描述. 在线性量子系统中, 新定义的几何相位是各个本征态 Berry 相位的权重平均.

关键词 绝热演化, 几何相位, 玻色-爱因斯坦凝聚

Adiabatic geometric phase of a general quantum state

WU Biao[†]

(Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

LIU Jie

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

Abstract A geometric phase is found for the adiabatic evolution of a general quantum state; it reduces to Berry phase when applied to eigenstates. This new phase applies to both linear quantum systems and nonlinear quantum systems, and should be particularly useful for the latter for which the adiabatic evolution of a general quantum state cannot be described in terms of a superposition of eigenstates. For linear quantum systems, our new phase becomes a statistical average of the Berry phases for all eigenstates involved.

Keywords adiabatic evolution, geometric phase, Bose-Einstein condensates

在 1911 年召开的第一届索耳未(Solvay)会议上,洛仑兹(Lorentz)曾向爱因斯坦提出了一个简单而有趣的单摆问题^[1]. 这个单摆和通常情况唯一不同的地方是它的绳长可以随意调节. 如图 1 所示. 爱因斯坦发现,如果绳长变化非常缓慢,那么单摆的能量和振动频率之比是个守恒量. 从被讨论问题的简单性可看出,洛仑兹和爱因斯坦间的这个讨论可能是自牛顿建立经典力学以来关于绝热演化的第一个讨论. 绝热演化是指在一个或多个系统参量缓慢变化下系统的动力学演化. 图 1 中的可变绳长单摆是个典型而又最简单的例子. 后来人们对绝热演化进行了系统的研究,建立了经典力学中的绝热定理^[2]. 这个定理说,在绝热演化中系统的作用量是守恒不变的. 作用量因而被称作绝热守恒量. 有兴趣

的读者可以验证一下单摆的能量和振动频率之比就是它的作用量.

自薛定谔在 1924 年写下他著名的方程,量子系统的绝热演化很快引起了人们的注意. Born 和 Fock 在 1928 年证明了量子力学中的绝热定理^[3,4]. 这个定理告诉人们,每个本征态上的布居数在绝热演化过程中是守恒的. 或者说,在绝热演化中量子系统的能级之间没有隧穿. 1984 年, M. V. Berry 在对绝热演化的研究中取得一个里程碑式的突破. 他发现,除

* 中国科学院“百人计划”、国家自然科学基金(批准号:10474008)和国家重点基础研究发展计划(批准号:2005CD724508)资助项目

2005-05-09 收到初稿, 2005-06-29 修回

† 通讯联系人. Email: bwu@aphy.iphy.ac.cn

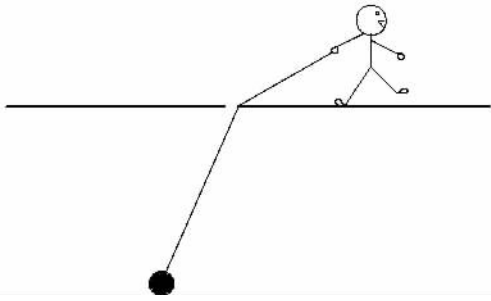


图1 绳长可变的单摆

了绝热守恒,量子系统在绝热演化中还有一个奇特的性质.如果系统沿参数空间中的一个环路演化一周(见图2),那么它的本征态在动力学相位之外会得到一个具有几何性质的相位^[5].这个令人惊奇的发现立刻在物理学界引起了极大的兴趣.首先,这个几何相位很快在光学和核磁共振实验中被观测到^[6],随后人们对它进行了各种推广,更重要的是它在很多领域得到了广泛应用,比如 Bloch 电子的动力学^[7].这个几何相位现在被称作 Berry 相位,人们对其的研究热情一直持续至今.有兴趣的读者可以参考文献[8-9]那里有详细介绍.有趣的是在经典力学中存在类似的几何角,现称 Hannay 角^[10].略具讽刺意味的是这个几何角是在 Berry 相位的启发下发现的.尽管经典力学比量子力学早建立两百多年.

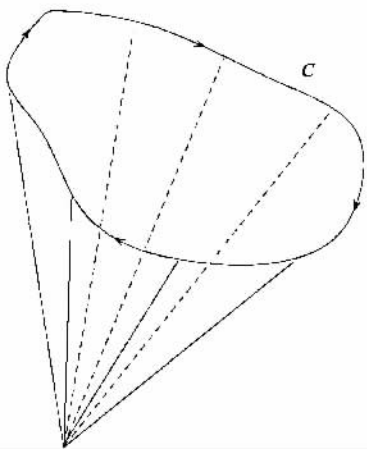


图2 参数空间中的一个闭合回路

在介绍我们的工作之前,有必要简单介绍一下 Berry 相位.考虑一个依赖于某些外界控制参数 $\mathbf{R} = \{R_1, R_2, R_3, \dots\}$ 的量子系统 $H(\mathbf{R})$.在任何一个给定参数 \mathbf{R} ,这个系统有一套能量本征态

$$H(\mathbf{R})|\psi_n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R})|\psi_n(\mathbf{R})\rangle \quad (1)$$

根据量子绝热定理^[4],在绝热演化中,量子系统如

果一开始就处于某个本征态 $|\psi_n\rangle$,它将一直处于该本征态.但该本征态的相位会发生变化.长期以来,人们认为这个相位变化是动力学的,由 $\int dt E_n(\mathbf{R}(t))$ 给出.直到 1984 年, Berry 才发现这是不对的.他发现,如果绝热演化是沿一个环路进行,那么量子系统在沿环路回到原来状态时会得到一个动力学相位之外的几何相位.这个相位是

$$\gamma_n(C) = \oint_C d\mathbf{R} \langle \psi_n(\mathbf{R}) | i \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | \psi_n(\mathbf{R}) \rangle. \quad (2)$$

上式清楚表明, Berry 相位只依赖于闭合曲线 C 的几何性质,和量子系统如何沿这条曲线 C 缓慢演化的细节无关.注意 Berry 相位只对本征态有定义.

我们最近对这个有趣的几何相位进行了推广,对包括非本征态的一般量子态定义了一个新的几何相位^[11].这个新相位同时适用于线性量子系统和非线性量子系统.我们的动机来自对稀薄原子气的玻色-爱因斯坦凝聚物(BEC)的研究. BEC 系统在很多情况下可以用一个宏观波函数 ψ 来描述,具有一个整体相位.我们想知道,如果 BEC 在某个参数空间绕一环路绝热演化一周,这个 BEC 的相位会如何变化,特别是这其中对应的几何相位是什么.可是, BEC 是一个非线性量子系统因为描述 BEC 的宏观波函数满足一个非线性波动方程, Gross-Pitaevskii 方程^[12].这样,要回答前面提及的问题我们就必须将 Berry 相位推广到非线性量子体系中.

不失一般性,考虑如下非线性薛定谔方程

$$i \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H(\psi^* \psi, \mathbf{R}) |\psi\rangle, \quad (3)$$

其中 $|\psi\rangle = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n)$, ψ_i 是波函数 ψ 在用一套归一的本征基矢展开时的第 i 个分量.我们假设系统具有整体规范不变性因为物理上令人感兴趣的系统都有这种对称性.当 H 不依赖于波函数 ψ 时,以上便是通常的线性薛定谔方程.对(3)式描述的非线性系统,可以类似于线性系统定义本征态,

$$H(\psi_n^* \psi_n, \mathbf{R}) |\psi_n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R}) |\psi_n(\mathbf{R})\rangle. \quad (4)$$

我们可以直接用(2)式来定义这些非线性本征态的绝热几何相位.这样,将 Berry 相位推广到非线性量子系统的工作似乎就如如此简单地完成了.下面我们会看到这只是很小的一步.由于线性量子系统中存在线性叠加原理,我们可以用本征态来研究一般量子态的行为.特别地,虽然 Berry 相位只对本征态有定义(2)式,但在线性叠加原理的基础上它可以

被用来描述一般量子态的绝热演化. 具体地说, 如果初始状态是一个一般量子态

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_n a_n |\psi_n(\mathbf{R}_0)\rangle \quad (5)$$

其中 $\mathbf{R}_0 = \mathbf{R}(t=0)$. 根据量子绝热定理^[4], 每个本征态上的布居数 $|a_n|^2$ 在绝热演化中守恒. 这样, 系统在沿一个环路绝热演化一圈后, 参数 \mathbf{R} 回到初始值 \mathbf{R}_0 而同时这个一般量子态演变成

$$|\psi(T)\rangle = \sum_n e^{i\gamma_n(C) - i\int_0^T dt E_n(\mathbf{R}(t))} a_n |\psi_n(\mathbf{R}_0)\rangle, \quad (6)$$

其中 T 是整个绝热演化所用的时间. 以上表明, 利用线性叠加原理, 只对本征态有定义的 Berry 相位可以充分地描述一般量子态的绝热演化. 在非线量子系统中, 情况就完全不一样了. 这里没有线性叠加原理, 用(2)式定义的本征态的绝热几何相位不再能用于描述一般量子态的绝热演化. 因而要将 Berry 相位推广到非线量子系统中, 我们必须对一般量子态直接定义几何相位, 上面对本征态的定义是远远不够的.

我们现在介绍在非线量子系统中定义一般量子态的绝热几何相位. 系统的非线性性构成了很大的困难, 量子力学中常用的处理问题的方式方法, 比如(5)式中的线性展开, 都不再适用. 为了克服非线性带来的困难, 我们将非线量子系统在数学上表述成一个经典哈密顿系统. 具体地说, 存在一个经典哈密顿量 $H(\psi^*, \psi; \mathbf{R})$; 应用泊松括号 $\{\psi_j^*, \psi_k\} = i\delta_{jk}$ (3)式中的运动方程可以表述成这个哈密顿系统的哈密顿运动方程,

$$i \frac{d}{dt} \psi_j = i \{\psi_j, H(\psi^*, \psi; \mathbf{R})\} = \frac{\partial}{\partial \psi_j^*} H(\psi^*, \psi; \mathbf{R}) \quad (7)$$

注意这里把量子系统表述为经典哈密顿系统在数学上是严格的, 它不同于半经典近似下 ($\hbar \rightarrow 0$) 的经典-量子对应. 量子系统具有这种哈密顿结构这个事实其实已被注意到很长一段时间了, 读者可参考文献 [13, 14]. 具体看个例子, 一个非线性二能级系统,

$$i \frac{d\psi_1}{dt} = [c |\psi_2|^2 + \frac{Z}{2}] \psi_1 + \frac{X - iY}{2} \psi_2, \quad (8)$$

$$i \frac{d\psi_2}{dt} = [c |\psi_1|^2 - \frac{Z}{2}] \psi_2 + \frac{X + iY}{2} \psi_1. \quad (9)$$

这个系统的经典哈密顿量是

$$H = \frac{X}{2} (\psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1) - i \frac{Y}{2} (\psi_1^* \psi_2 - \psi_2^* \psi_1) +$$

$$\frac{Z}{2} (|\psi_1|^2 - |\psi_2|^2) + c |\psi_1|^2 |\psi_2|^2 \quad (10)$$

读者可将其代入(7)式, 通过一番简单的代数计算重新得到上面的非线性二能级系统.

经典哈密顿系统可以被分为可积和不可积系统. 从上面我们看到量子系统具有经典哈密顿结构, 因而它们也可以从这个经典的角度被分为可积和非可积系统. 为了下面好表述, 我们称这种可积性为量子系统的经典可积性. 按这种分法, 所有线性量子系统都是经典可积的. 注意这种可积性和熟知的与量子混沌有关的量子可积性是不一样的. 本文将只考虑经典可积非线量子系统. 在文献 [11] 中, 我们也讨论了不可积系统.

在经典可积的非线量子系统中, 可以通过正则变换引入作用量 $I = \{I_1, I_2, \dots, I_N\}$ 和角变量 $\theta = \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N\}$. 这些变量对系统的描述和波函数 ψ 在数学上是等价的. 这个变换意味着非线量子系统的波函数 ψ 可以看作这些作用量和角变量的函数,

$$\psi = \psi(I, \theta; \mathbf{R}) \quad (11)$$

根据经典绝热定理 [2], 这些作用量是绝热不变量. 因而在绝热演化中, 波函数只是通过 θ 和 \mathbf{R} 随时间演化. 我们于是可以做如下展开

$$\begin{aligned} \psi | d | \psi \rangle &= \sum_{l=1}^N \psi | \frac{\partial}{\partial \theta_l} | \psi \rangle d\theta_l + \\ &\psi | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | \psi \rangle \cdot d\mathbf{R}. \end{aligned} \quad (12)$$

上式右边第二项清楚地依赖于参数空间的几何性质. 对其进行环路积分并作平均, 我们便得到了一般量子态的绝热几何相位,

$$\langle \gamma(c) \rangle = \int_0^1 d\mathbf{R} \langle \psi(I, \theta; \mathbf{R}) | i \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | \psi(I, \theta; \mathbf{R}) \rangle. \quad (13)$$

以上的平均是对所有具有相同作用量 I 的初始态进行的. 它的目的是去除新相位 γ 对角变量 θ 动力学的依赖. 如果 γ 依赖于 θ 的动力学, 它会受系统如何缓慢地沿闭合曲线 C 影响, 相位 γ 便不再是几何的.

现在将(13)式中定义的几何相位应用于几个特例. 先看本征态. 如果系统处于本征态 $|\psi_n\rangle$, 当 \mathbf{R} 不变时, 系统将始终处于该状态, 只有系统波函数 ψ 的相角在改变,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\theta(t)} |\psi_n(\mathbf{R})\rangle. \quad (14)$$

这表明这时系统实质上只有一个自由度, 它的作用量是 $I = \psi_n | \psi_n$ 而角变量就是波函数的相角 $\theta =$

ϕ . 于是对于绝热演化我们得到

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} |\psi\rangle = e^{-i\phi(\mathbf{R})} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} |\psi_n\rangle. \quad (15)$$

将其代入(13)式,便得到了本征态的几何相位, Berry 相位.

再看线性量子系统. 假设有一个一般量子态,它是 M 个本征态的叠加

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^M a_n |\psi_n(\mathbf{R})\rangle. \quad (16)$$

同样地,根据它在外界参数 \mathbf{R} 不变时的动力学,我们可以看出这种情况下,系统实质上有 M 个自由度. 选择 $|\psi_n\rangle$ 做基矢(3)式中的运动方程便成为 M 个独立的运动方程

$$i \frac{d}{dt} a_n = E_n a_n, \quad n = 1, 2, \dots, M. \quad (17)$$

由此不难看出,这种情况下,作用量就是布居数 $|a_n|^2$ 而角变量是 a_n 的幅角 ϕ_n . 强调一下,以上讨论是在 \mathbf{R} 固定的情况下进行的. 回到绝热演化,我们有

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} |\psi\rangle = \sum_{n=1}^M a_n e^{-i\phi_n(\mathbf{R})} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} |\psi_n\rangle. \quad (18)$$

将其代入(13)式,我们得到线性量子系统中一般量子态的几何相位,

$$\begin{aligned} \gamma &= \sum_{m,n=1}^M \int d\mathbf{R} a_m^* a_n \langle \psi_m(\mathbf{R}) | i \frac{d}{d\mathbf{R}} | \psi_n(\mathbf{R}) \rangle \\ &= \sum_{m,n=1}^M |a_n|^2 \int d\mathbf{R} \langle \psi_n(\mathbf{R}) | i \frac{d}{d\mathbf{R}} | \psi_n(\mathbf{R}) \rangle \\ &= \sum_{n=1}^M |a_n|^2 \gamma_n(C). \end{aligned} \quad (19)$$

在上式的计算中非对角项($m \neq n$)由于对幅角的平均而为零. 上式显示线性量子系统中一般量子态的几何相位是各个本征态 Berry 相位的权重平均.

最后,提一下我们在 2003 年的一个相关工作.

在这个工作中,我们将量子绝热定理推广到了非线性量子系统中^[16]. 回顾历史,我们知道自 1984 年 Berry 相位被发现后,量子绝热定理和 Berry 相位便构成了对线性量子系统中绝热性的一个完备描述. 另外, Hannay 角和经典绝热定理则是对经典力学中绝热性的一个完备描述. 我们这里提出的新的几何相位和我们 2003 年的工作^[16]同样是对非线性量子绝热性的一个完备描述.

参 考 文 献

- [1] Goldstein H. Classical Mechanics. Reading : Addison - Wesley, 1980. 531
- [2] Arnold V I. Mathematical Methods of Classical Mechanics. Berlin : Springer - Verlag, 1978
- [3] Born M, Fock V. Zeit. f. Phys., 1928, 51 : 165
- [4] Messiah A. Quantum Mechanics, New York : Dover, 1999. 738
- [5] Berry M V. Proc. R. Soc. London A, 1984, 392 : 45
- [6] Tycko R. Phys. Rev. Lett., 1987, 58 : 2281
- [7] Sundaram G, Niu Q. Phys. Rev. B, 1999, 59 : 14195
- [8] Bohm A, Mostafazadeh A, Koizumi H *et al.* The Geometric Phase in Quantum Systems. New York : Springer, 2003
- [9] 李华钟. 简单物理的整体性—贝里相位及其他. 上海 : 上海科技出版社, 1998
- [10] Hannay J H. J. Phys. A, 1985, 18 : 221
- [11] Wu B, Liu J, Niu Q. Phys. Rev. Lett., 2005, 94 : 140402
- [12] Dalfovo F, Giorgini S, Pitaevskii L P *et al.* Rev. Mod. Phys., 1999, 71 : 463
- [13] Weinberg S. Ann. Phys., 1989, 194 : 336
- [14] Heston A. Phys. Rev. D, 1985, 31 : 1341
- [15] Landau L D, Lifshitz E M. Mechanics. New York : Pergmon, 1976
- [16] Liu J, Wu B, Niu Q. Phys. Rev. Lett., 2003, 90 : 170404

封 面 说 明

立方 Cu_3N 热稳定性较差,因此在其薄膜的生长过程中,氮原子不断从 {111} 面析出,留下由富铜的 {111} 面包围的纳米晶粒. 当薄膜与衬底间聚集的氮气到达一定程度时,会引起 Cu_3N 纳米晶粒沿 {111} 面的滑移,类似于造山运动. 由于 {111} 面间角接近 72° , 因此由大量金字塔形的纳米晶粒堆积而成的隆起在中心处常常会呈现完美的五次对称性,向外沿展的分叉夹角则在 74° 左右. 这些微米大小的、高度对称的纳米晶隆起像撑开的小阳伞,在扫描电子显微镜下排列出一幅美丽的夏日海滩图景. 相关内容见: Ji A L *et al.* Nanotechnology, 2005, 16 : 2092.

(中国科学院物理研究所 曹则贤)