评 述

量子绝热定理,思想和方法*

李 华 钟†

(中山大学高等学术研究中心 广州 510275)

摘 要 阐述了量子绝热定理和绝热近似的现状、物理概念和方法,也回溯到它们的历史渊源和演变,强调 Berry 相位的发现对量子绝热定理的影响.

关键词 量子绝热定理,绝热近似,贝里相位

Quantum adiabatic theorem, ideas and approaches

LI Hua-Zhong†

(*Advanced Research Center Zhongshan University, Guangzhou* 510275, *China*)

Abstract The development of the quantum adiabatic theorem and adiabatic approximation before and after the discovery of Berry's phase is reviewed, with emphasis on the physical concepts involved.

Key words quantum adiabatic theorem, adiabatic approximation, Berry's phase

1 绝热原理或绝热假说

量子绝热过程的研究可以追溯到与玻尔的量子论(1913)的时期[1]. 普朗克的能量分立的假设提出后,玻尔的量子论研究了周期运动系统的量子化条件,建立氢原子量子理论,玻尔其后是索末菲的推广量子化条件

$$\oint p_i \mathrm{d}q_i = n_i h \quad n_i = 1, 2\cdots.$$

玻尔为了沟通经典力学和量子力学提出了对应原理. 玻尔原子的量子论和对应原理,是大家熟悉,是一般的量子力学教科书都列为必备的知识. 但是对同时的量子绝热原理(quantum adiabatic principle)的了解和认识就很少提及了. 当时并不是叫做绝热原理,爱因斯坦称之为绝热假说(adiabatic hypothesis). 这个物理思想的创立者是 P. Ehrenfest. 在经典力学,热力学,绝热不变量是一个重要的物理概念,经过玻尔兹曼,克劳修斯,亥姆霍兹,赫兹等大物理学家的研究. 1911 年 Ehrentfest 认识到绝热不变的概念对量子理论的重要性. 物理系统的两个不同状态如果可以通过一个或一组参数的很缓慢(可逆绝热变化)而彼此互通,这些参量 Ehrenfest 称之为绝热不变量. 这个原理从原则上解说了 Born - Sommerfeld 的量子化条件. 本来这量子化条件是一种未经证明的假说,根据绝热不变量的原理,量子化条件是自然的结果. 例如一维系统的相空间轨迹包围的面积是绝热不变量,由此简谐振子能量为量子的整数倍. 在量子力学出现之前,量子理论的发展遭遇困难和理论本身的矛盾. 那时绝热原理是对量子论有力的支持,量子力学出现后,建立了运动方程式,波动的或矩阵的,二象性或对易关系,测不准关系等是完全的一套. 绝热原理不再是那么基本和有用,也就很少继续被人们注意.

到 1928 年 Born 和 Fock 把绝热不变量原理的理念运用到量子力学波动方程. 从而引导出阐明薛定谔方程的绝热解. 这是现代我们所知道量子绝热定理. 如同 Bohr 的对应原理一样,绝热原理在量子力学出现之前的旧量子论时期,起了重要的作用,就是经典物理与量子物理之间的过度桥梁,沟通两者的渠道. 为旧量子论铺垫了合理的基石和填补逻辑的缺隙. 当然,量子力学建立之后,1928 年 Born 和

* 2004 - 05 - 09 收到

† Email:puaarc@ zsu. edu. cn

Fock[2] 从绝热原理衍生出对量子系统绝热演化过程的解的认识,这是对含时薛定谔方程,在缓变的哈密顿量中缓变参数是无穷小量驱动下的解,波函数绝热解的认识,称为量子绝热定理(quantum adiabatic theorem),绝热过程是量子物理系统的一大类型,相当普遍的过程,它并不纳入微扰论的范畴,因而绝热定理是量子力学薛定谔方程应用的重要一页. 然后发展为绝热近似(adiabatic approximation),即是驱动哈密顿的缓变参数是有限的小,但不是无穷小的情况下,薛定谔方程的近似解,有些量子力学教科书把这种情形也叫做量子绝热定理. 有的量子力学教科书把既缓慢又弱小的干扰这种情形叫做绝热微扰(adiabatic perturbation). 这样量子绝热原理的思想就演变成为量子力学的一种求解的方法. 和绝热定理差不多同时(1927 年),量子力学应用到分子物理里也出现了 Born-Oppenheimer 方法[3]. 有的书籍文章也把它叫做绝热近似. 原先的绝热原理还受限制在周期性的系统,现在绝热定理绝热近似就各自可以应用于周期为 $T\to\infty$ 或有限周期的系统了.

绝热不变量在经典力学中已经研究很清楚. 用绝热不变量去联系两个以绝热可逆过程互变的力学系统的关系是经典力学热力学的经典方法. 这种方法被 Ehrenfest 移用到原子的量子论的中联系两个绝热相关的两个态. 经典力学里,一个周期为 T 的系统的哈密顿量依赖于缓变参数 λ,$H(q,p;\lambda)$[4],绝热不变量为

$$I=\frac{1}{2\pi}\oint p\,\mathrm{d}q. \tag{1}$$

例如一维谐振子

$$H=\frac{1}{2}\frac{p^2}{m}+\frac{1}{2}m\omega^2q^2, \tag{2}$$

$$I=E/\omega, \tag{3}$$

I 是绝热不变,表示当谐振子参数 $\omega=2\pi/T$ 缓变时,谐振子能量与其频率成正比. 经典力学绝热定理是说,当参数缓变时,绝热不变量保持为常量. 以这经典定理去合理解释量子论的猜想. 绝热原理是旧量子论时期代表性的思想和方法,它试图吸取经典物理概念和方法,著名的'对应原理'就是这种思想的主要代表.

2 量子绝热定理和量子绝热近似

绝热过程物理上常说是缓慢演化的过程,当哈密顿 H 通过参数 $\lambda(t)$ 依赖时间,所谓参量 λ"缓慢"变化,指对时间而言,在运动的一个周期 T 之中,λ 的时间变化率满足[4]

$$T\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}\ll\lambda, \tag{4}$$

如系统缓变的运动,使 $T\to\infty$,本式意味着1)

$$\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}\sim 0, \tag{5}$$

即 $\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}$ 是一无穷小量,但它不是等于 0 的量.

量子绝热定理(adiabatic theorem)[2,5] 讲的是含时哈密顿系统的薛定谔方程的解. 这是一类型的近似解,系统的时间演化是绝热的过程,哈密顿可以是明显含时,也可以是通过一组参数($\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_i$)依赖时间. $\lambda_i=\lambda_i(t)$. 绝热要求 $H(t)$ 或 $H[\lambda_i(t)]$ 的时间变化缓慢,应该说是'无限地缓慢'(infinitely slow),以数学语言来说,就是参数 λ_i 的时间变化率 $\frac{\partial\lambda_i}{\partial t}\to 0$. 用微积分的知识来说,$\frac{\partial\lambda_i}{\partial t}$ 这个参数的时间变化率是一个无穷小量,它比您能指定或给出表征系统的任何小的标度量更小. 绝热定理还要求系统的瞬时冻结的哈密顿的本征值无简并,所谓瞬时冻结的哈密顿是说,在每一瞬时 $t_0,t_1,t_2,\cdots$,$H(t)$ 可以被看成在该瞬时与时间无关的量,因此这里是用了一族哈密顿 $H(t_0)$,$H(t_1)$,…来代替了 $H(t)$,t_0,t_1,…是无穷多次相邻的瞬时. 这样我们可以引入这一族哈密顿的每一个成员 $H(t_i)$ 的瞬时定态方程和本征值本征函数. 对于原来的 $H(t)$ 没有定态方程是不可以给出能量本征值能量本征函数的,有的书上用瞬时的哈密顿给出瞬时本征方程,它的意思也就是这里我们所讲,用一定 t 值的一系列哈密顿量来刻划系统的演化,t 在这里不是一个自变量而是作为一个参数,对于绝热过程如哈密顿量显含时间,在哈密顿 $H(t)$ 中引入一个参数 ε 表征 $H(t)$ 时间变化率

---

1)对(5)式的理解,请参照(4)式,(4)式写成 $1/\left(\frac{\lambda}{T}\right)\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}\ll 1$,左端是无量纲的. 对无限缓慢系统 $T\to\infty$,所以 $\frac{\lambda}{T}\to 0$,$\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}\to 0$. 同样有的著作也写成 $\frac{\partial H}{\partial t}\sim 0$(例如文献[5]中 Bohm 一部著作),这是完全绝热的条件,也就是一般说的'绝热条件'.(4)(5)式的讨论对经典力学系统和量子力学系统都适用. 在下文第(15)式,所表达的是当 $\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}$ 是有限大的小量时能取'绝热近似'的条件. $\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}\to 0$ 表示 $\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}$ 的量值 ε 是一个无穷小量,无穷小量不是一定量值的常量,它比能给定的任何定值更小,但它不是 0,它的极限是 0,所以它本身包含一个以极限值为参照的量,当讲到 $\varepsilon\to 0$ 时,不需要定立一个参照比较的量.

的大小，令在 $-\infty<t<\infty$ 区间中，$H(t,\varepsilon)=H(\varepsilon t)$. 所谓"无穷地缓慢"或"绝热极限"(adiabatic limit)是指 $\varepsilon\to 0$，有时文献上写成 $H(\varepsilon t)=H(t/\tau)$：$\tau$ 是时间标度，绝热极限是 $\tau\to\infty$. 这也是说在上述参数化的哈密顿 $H[\lambda_i(t)]$，$\frac{\partial\lambda_i}{\partial t}\to 0$ 相当于 $\tau\to\infty$. 当然"绝热演化"(adiabatic evolution)是一个理想的过程，无限缓慢是一个假想的情况，绝热定理就是用假想的完全绝热演化去逼近真实的物理过程，而且是唯一地近似真实的物理过程，用一族的哈密顿的本征值谱(族中每个哈密顿各自有一套)的谱分析去和真实的物理演化过程作比较. 令 $s\equiv t/\tau$，$H(s)$ 以 s 为参数作为一族不同 s 值的哈密顿，薛定谔演化算子 $U(t)$ 满足的演化方程为($\hbar=1$)

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}U(t)=H(t/\tau)U(t), \tag{6}$$

亦即
$$\frac{\mathrm{i}}{\tau}\frac{\partial}{\partial s}U(s)=H(s)U(s). \tag{7}$$

初条件为 $U(0)=1$，绝热演化过程是极限 $\tau\to\infty$ 下的演化过程. 引入虚拟过程的演化算子(evolution operator) U_A，假定它必需保持族中每个哈密顿的本征值谱，各自分立分开. 绝热定理就是把物理过程与虚拟过程在量级为 τ 的时间尺度下作比较，令

$$S(s)\equiv U_A^+(s)U(s), \tag{8}$$

如有

$$S(s)=1, \tag{9}$$

那就表示虚拟过程与真实过程完全相合，是理想的情形. 当然实际上，上式不可以等式成立，而只可以

$$U_A^+(s)U(s)\approx 1, \tag{10}$$

绝热定理给出

$$S(s)=1+O(1/\tau). \tag{11}$$

Kato(1950)[6]给出数学上严格和扩充的证明，基本的物理内涵早由 Born 与 Fock[2] 在 1928 年给出. 从物理上看，虚拟过程，族中系列的每个哈密顿有一套瞬时定态，可以粗略地说，绝热定理告诉我们，物理的绝热过程中，系统一旦从处于初态为 $H(t=0)$ 本征态的 $|n(t=0)\rangle$ 开始，它以后就随时间演化到 $t=T$ 时，处于末态为 $H(T)$ 的瞬时本征值谱中另一瞬时量子数仍然为 n 的瞬时本征态 $|n(T)\rangle$，末态波函数的形式为

$$|\Psi_\tau(T)\rangle=\exp\left[-\mathrm{i}\int_0^T E(t/\tau)\mathrm{d}t\right]|n(T)\rangle-O(1/\tau). \tag{12}$$

绝热极限 $\tau\to\infty$ 下，$|\Psi_\tau(T)\rangle$ 与 T 时瞬时本征态 $|n(T)\rangle$ 只差一相乘的相位因子和量级为 $1/\tau$ 的项，随着 $\tau\to\infty$，$O(\frac{1}{\tau})\to 0$. 这是物理学者们都熟悉的，(12)式是量子绝热定理，当 ε 是有限大小的小参数时，如略去 $O(\frac{1}{\tau})$，$|\Psi_\tau(T)\rangle$，这就是绝热过程下薛定谔方程的近似解.

$$(\text{完全绝热过程波函数})-(\text{物理绝热过程波函数})=O\left(\frac{1}{\tau}\right), \tag{13}$$

$$(\text{物理绝热过程波函数})=(\text{完全绝热过程波函数})-O\left(\frac{1}{\tau}\right). \tag{14}$$

↑ 绝热定理给出　　↑ 绝热近似略去此项

有时我们研究的物理系统，不是无限地缓慢，而是有限地缓慢，即$\frac{\partial\lambda}{\partial t}$虽小，但仍是有限的小量，这时如果略去 $O\left(\frac{1}{\tau}\right)$ 的大小，就是通常叫做绝热近似. 为估计这样略去 $O\left(\frac{1}{\tau}\right)$ 项的合理性，在许多教科书上证明[5]，如果

$$\left|\frac{\langle n(t)\left|\frac{\partial H}{\partial t}\right|m(t)\rangle}{E_n-E_m}\right|\ll 1, \tag{15}$$

则估计略去 $O\left(\frac{1}{\tau}\right)$ 量级项是合理的. 所以在有限的 $\frac{\partial\lambda}{\partial t}\sim\varepsilon$ 小量下，此式作为量子绝热近似条件2). 自然可以看出在完全绝热条件$\frac{\partial\lambda}{\partial t}\approx 0$ 下，$O\left(\frac{1}{\tau}\right)\to 0$，这时这不等式(15)当然是自动成立了. 在有的量子力学教科书中的阐述，对 $O\left(\frac{1}{\tau}\right)\to 0$(无穷小量)和 $O\left(\frac{1}{\tau}\right)\sim\varepsilon$(有限小量)的区别和略去 $O\left(\frac{1}{\tau}\right)$ 项，并没有仔细地分析. 两个表述一个是较强的条件，一个是较弱的条件，所以有时把它们都笼统称为绝热条件或绝热近似条件而没有加以区别，当讨论理论上的问题时，一般用前者，当人们处理一个具体问题，例如原子中电子的周期运动，(15)式是有用的估计. 从基本概念严格来说两者应有区别，这里有几点要指出的：

2) 参看注 1)

(1)在(12)式中的相位因子 $\exp[-\mathrm{i}\int_0^T E(t/\tau)\mathrm{d}t]$ 的出现,在有的文章中说这只是人们"直觉"的猜想,说绝热定理没有证明这一因子,其实量子绝热定理的近代表述中这个因子已在定理证明中包含在内,例如已写入了标准的教科书和教材,如:Bohm 的《量子理论》和 Messiah 的《量子力学》[5];Berry 的 *Ferrara Lectures*[5].

(2)有一些书上说(12)式不满足薛定谔方程,上述这些教材都讲清楚,这种说法错误,从本文以上论述,更清楚表明(12)式是绝热极限下的量子态是薛定谔方程的绝热解,在绝热近似下略去 $O\left(\frac{1}{\tau}\right)$ 项是近似解.

(3)(15)式作为量子绝热近似的条件,在 ε 很小但仍是有限大小的情况下,作定性估计. 在符合绝热近似条件下,ε 虽则是很小量,但并非微扰参数. 绝热近似不是微扰论. 微扰论处理互作用弱扰动情形. 绝热近似是处理缓慢的互作用效果. 当弱扰动又是缓慢变化时,就是绝热微扰.

(4)量子绝热定理和绝热近似两者的概念不应混淆.

我们已经讨论过,无限地缓慢的过程,ε 是无穷小,只有在这极限下的绝热过程才是完全绝热的. 当物理过程是有限地缓慢,即 ε 是虽小但有限时,过程就不是完全地绝热了. ε 是有限小量,当 ε 又恰好在哈密顿中起着微扰参数的作用时,这时以 ε 的幂次展开是通常的微扰方法. 这包含 $\varepsilon^k, k>1$ 幂次的"高阶"修正,就不是绝热的."绝热"是 $\varepsilon\sim 0$ 的极限,ε 有限而又计算到 $\varepsilon^k, k>1$ 的微扰计算,不是高阶修正的绝热近似,而是对绝热近似的非绝热修正. 为了表述由于 ε 有限引起的修正(当然必须仍然保持不发生量子跃迁,略去 H 的非对角矩阵元). 一个方法是用微扰论,这是人们熟知的标准方法,另一方法是 Berry 用的绝热迭代(adiabatic iteration). 每一次迭代都包含了 ε 的无限阶次,末态的瞬时本征态与初态的瞬时本征态并不完全一致,而是近似地符合,经过每一迭代末态都更加迫近初始的瞬时本征态.

还有一种表述和绝热近似有关的方式,叫做"绝热开关"(adiabatic switching). 当施于系统的微扰的作用时间足够长,微扰的变化足够缓变,这就是"绝热微扰". 描述这种作用的办法是引入一个"绝热因子"(adiabatic facor)使微扰作用从零开始慢慢地增加到达了它的全量,然后又慢慢地减弱了,直到消失,即假定 t 在时间间隔($-\infty$,$+\infty$)当中

$$H = H_0 + \mathrm{e}^{|t|/\tau}\cdot H' \tag{16}$$

$$\begin{aligned} &t\to-\infty,\ \mathrm{e}^{-|t|/\tau}H'\to 0;\ H\to H_0\\ &t\to+\infty,\ \mathrm{e}^{-|t|/\tau}H'\to 0;\ H\to H_0\\ &t=0,\ H_0+H' \end{aligned} \tag{17}$$

τ 是有限大小而且足够的大. 这种操作叫做"绝热开关"(adiabatic switching). 因为当处理两体散射问题时,初末态假设是自由粒子态,互作用 $V(x,t)$ 在 $t=\pm\infty$,$V(x,t)=0$. 这条件当互作用是有限作用范围或短程时是满足的,倘若是长程力,这个条件不满足时,就需要引入绝热开关的处理(prescription)以使初末态自由粒子条件得以满足,因子 $\mathrm{e}^{-|t|/\tau}$ 又叫做"切断因子"(cut off factor),引入它还有一种作用是将含时互作用 $V(x,t)$ 引起末态的振荡因子影响抹平,因为这种振荡不是物理存在的而只是数学处理上引起的它使积分无定值,引入切断因子,然后令 $\varepsilon\left(=\frac{1}{\tau}\right)\to 0$. 当处理两体问题(或多体问题),$t=-\infty$ 在作用仍然存在,初态不是粒子的自由态,$t=+\infty$ 互作用也未必消失,这时求解 H 的基态,仍然可以用绝热开关假设可以找到. 按(16)式划分的 H_0 和 H',其中 H_0 是已知它的基态 $|\Psi_0\rangle$,量子场论常用的互作用表象,就是这样做,使用这个绝热开关的操作可以导出绝热近似另一方式表述. 当系统不受微扰时 H_0 的本征态为 $|\Psi_0\rangle$,在绝热微扰 H' 作用下,受微扰系统 H 的瞬时本征态 $|\Psi\rangle$ 可用 H_0 的本征态表出. 这个论断是 Gell-Mann 和 Low 证明的[12]. 这定理类似量子绝热定理的推广.

3 Berry 发现前后的量子绝热定理

自从 1928 年 Born 和 Fock 证明绝热定理以后,五十余年不断地有许多研究,拓展绝热定理的使用条件. Born 和 Fock 原先的证明是要求无简并能谱,无连续能谱等条件. 到 1950 年 Kato[6] 作出数学上较严格的证明,并把条件拓展到有部分的连续谱,以后也还有继续的发展[7],例如把证明推广到 $1/\tau$ 的高阶等等. 另一方面对于绝热跃迁(adiabatic transition),隧通(tunneling),绝热输运(adiabatic transport),以至应用到量子 Hall 效应[7,8]. 其应用深入到原子分子物理,核物理,凝聚态物理和激光物理. 经过了三十多年细致的分析,量子绝热定理在数学基础方面和物理应用方面都蔚成大观. 令人出乎意料的是 1984 年竟然还出现一项 Berry 重要的发现[11],导致量子力学相位物理概念的新的认识. 这就是从

考察量子绝热定理而发现的量子力学波函数的几何相位因子(quantum geometrical phase factor). 我们在第1,2节讲的是Berry的发现前的定理从思想到方法的演变.

绝热过程看起来是一种特定的物理过程,不带根本性的物理意义,这也是一般教科书上处理这一问题常持的观点. 不过如果从更普遍的观点来看,绝热参数驱动的物理系统实际上是系统与环境的关系,缓变的参数代表的是系统外部环境的渐变,通过缓变参数去驱动系统的哈密顿,操控系统的演化,从这一观点来看绝热定理有普遍的意义. 例如,一个大系统A可以划分为两个子系统B,C,假如能成功划分使系统B成为系统C的环境,C处在B的影响下演化,C却不会明显地影响B. 如果B在缓变,则可以施用绝热定理于C的演化,解出它的态随时间的变化. 当B和C一个是快变运动,一个是慢变运动. 这时也可以应用量子绝热定理去处理,这方法称为Born - Oppenheimer近似[3,11]. 因此,量子绝热定理表示在绝热极限下,量子系统在缓变环境下保持了态的稳定. 量子绝热近似则在可以忽略某些不稳情况(禁止量子跃迁,忽略哈密顿非对角矩元素等)下求解.

Berry的发现是量子绝热定理除了缓变环境对系统的稳定演化的影响,还有量子演化有记忆历史的一面,即态的演化会依赖于过程的历史,即是说波函数含有一个依赖过程历史的因子,就是几何相位因子. 下面我们讨论Berry的发现和这发现后的量子绝热定理.

量子绝热定理的原先陈述对于系统的哈密顿的要求的条件主要是,$H(t)$缓变,H的本征值谱分立无简并,后来的发展对H的条件拓展了应用限制. 例如允许有部分连续谱,始态必需为分立的等等. 绝热定理给出末态波函数为(12)式

$$\begin{aligned}&|\Psi_\tau(T)\rangle\\&=\exp\left[-\mathrm{i}\int_0^T E(t/\tau)\,\mathrm{d}t\right]|n(T)\rangle.\end{aligned}\tag{18}$$

这是薛定谔方程在绝热极限下的解,称为绝热解(adiabatic solution). Berry的研究是在绝热过程的哈密顿$H(t)$加上一条件,要求$H(t)$不只是缓变,而且是循回的(cyclic). 这就给$H(t)$以新的物理条件,过去一般隐含同意以为这条件不会改变(18)式的解. Berry的研究告诉我们这个条件给予$H(t)$新的物理:(在初值条件外加上H不同的物理条件)因而所得薛定谔的解就可能有所不同3). Berry提供的解是:

$$\begin{aligned}|\Psi'_\tau(T)\rangle&=\exp[\mathrm{i}\gamma(c)]\exp\left[-\mathrm{i}\int_0^T E(t/\tau)\,\mathrm{d}t\right]n(T)\rangle\\&=\exp[\mathrm{i}\gamma(c)]\exp\left[-\mathrm{i}\int_0^T E(t/\tau)\,\mathrm{d}t\right]n(0)\rangle.\end{aligned}\tag{19}$$

(19)式比(18)式多了一个相位因子$\exp[\mathrm{i}\gamma(c)]$. Berry证明这个相位因子可以是非平庸的(non - trivial),可观测有物理意义,特别地它只依赖参数λ空间λ缓变所刻划的闭合路径C,而不依赖λ变化的速率,不依赖H的互作用细节. $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma(c)}$就称为几何相位因子,$\gamma(c)$是初末态相位差,因为已对$H$加上循回条件,所以$C$是闭合回路.

由此看出在Berry发现之后,对循回过程而言量子绝热定理是(19)式,但同时也清楚,Berry发现前的绝热定理在循回过程外的绝热过程仍然正确. Berry的发现不会对原先没有循回条件的哈密顿系统的量子绝热定理作出修正,更不必说要作重新推导了. 也不能去否定(18)式是薛定谔方程的解4). 由于有循回条件的哈密顿和没有循回条件的哈密顿是两种不同的物理,虽然相同的初始条件,但是还有不同边界条件,因而两者都可以是薛定谔方程的解. Berry的发现是开拓了新条件下量子绝热定理,找出新的物理,而没有否定和原先条件下的量子绝热定理. 从Born - Fock以来的量子绝热定理在原先的条件下仍然成立. 一些量子力学经典的教科书[5,10],例如Schiff的书[10]对绝热定理,对相位的陈述并不涉及循回哈密顿仍然正确[11].

Berry发现对量子绝热定理的影响,就在对循回绝热过程的认识. 这情况是过去六十年来被忽视了的. 物理世界中存在的绝热过程,除了量子绝热定理所规辖的过程之外,还有其他绝热过程,例如绝热跃迁,在Berry相位发现之前都已被很仔细地研究过. Berry发现之后,从绝热循回过程的量子几何相位诱发下,对跃迁矩阵元的几何因子也进行了理论和实验的研究. 这些发展显示对量子力学几何效应的研究[11]自Aharonov - Bohm效应以来的进展了一大步. 这些不是本文所讨论的范围. 本文只集中注意在

3) 循回演化(cyclic evolution)与周期运动(periodic motion)不完全相同,周期是指可无限次重复的运动. 循回只是要求一次性的末态返回到始态,$H(T)=H(0)$,参数化后$\lambda(T)=\lambda(0)$. 波函数初末态的相位可以一样或差一相位因子,$\Psi(t_f)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\Psi(t_i)$.

4) 这里不存在与微分方程式解的唯一性定理的矛盾,是完全符合解的唯一性. 数学上初值问题唯一性定理的条件是Lipschitz条件,它也是对一定的相同的初值和边值条件下,相同的哈密顿情况下才成立. 这里(18)(19)两式各对应于不同物理条件的哈密顿. 对于一些物理系统$\gamma(c)$可能是平庸(trivial)的,这时(19)式的解就回到(18)式的解.

量子绝热定理，下面我们讲 Berry 发现之后对量子绝热循回过程绝热定理的几何性质的认识. 现在理论物理学者认识循回绝热演化过程相应于波函数态矢 ψ 沿参数空间路径的平行移动[9]. 这平行移动过程遵从的法则是

$$\langle \psi \left| \frac{d\psi}{ds} \right\rangle = 0, \tag{20}$$

s 是沿回路某起点的沿线距离[9]. 从这个角度去看，量子绝热定理就是态矢平行移动一周后方向的总体改变，表现为波函数的相位改变. 初末态差异在一个几何性的相位因子即(19)式中的 $\exp[i\gamma(c)]$. 这样的理解提供了绝热过程背景——环境(缓变参数)和历史(依赖路径)对物理过程的影响，而这影响主要是几何性质，而不大依赖互作用的动力学细节.

致谢 作者感谢上海复旦大学苏汝铿教授有启发的讨论.

参 考 文 献

[1] Klein M J, Paul Ehrenfest. The making of a theoretical physicist. vol. I (中译本，高达声等译. 清华大学出版社，1999); Landau L D, Lifshitz E M. Course of Theoretical Physics Quantum Mechanics. (3rd ed). 171; Mechanics. 154, 159(郭奕玲，沈慧君. 物理学史. 清华大学出版社，1993, 278)
[2] Born M, Fock V. Z. Phys., 1928, 51: 165
[3] Born M, Oppeenheimer J R. Ann. Phys. (Paris), 1927, 84: 457
[4] Landau L D, Lifshitza E M. Theoretical Physics Mechanics, 1963
[5] Messiah A. Quantum Mechanics, Vol. II, North Holland, 1970; Bohm D. Quantum Theory (2nd ed). Prentice Hall, 1951; Bohm A. Quantum Mechanics: Foundation and Application (2nd ed). Spring - Verlag, 1993 ChXXII; Avron J E, Seiler, Yaffe L G. Comm. Math. Phys., 1987, 110: 33
[6] Kato T, J. Phys. Soc. Jpr, 1950, 5: 435; Garrids L M. J. Math. Phys. 1964, 5: 355; Lenard A. Ann. Phys., 1959, 6: 261; Nencius G. Comm. Math. Phys., 1981, 82: 121; Sancho S J. Proc. Phys. Soc. Lond., 1966, 89: 1
[7] Joye A. Proof of the Landau-Zener Formula, Preprint CPT - I13288 France 1992; Joye A, Pisfter C E. Phys. Lett. A, 1992, 169: 62
[8] Avron J E. in LesHouches Lecture season LX1. 1994. 745—796, Ch. 13. Adliabatic Quantum Transport. Akkermans *et al* (ed.). Mesoscopic Quantum Physics, 1995
[9] Berry M V. Quantum Adiabatic Anholonomy, Lectures at Ferrara School of Theoretical Physics, 1989; Simon S. B. Phys. Rev. Lett, 1983, 51: 2167
[10] Schiff L I. Quantum Mechanics (3rd ed.) MeGraw Hill, 1963
[11] 李华钟. 简单物理系统的整体性——贝里相位及其他. 上海科技出版社 1998, 第 7, 9 章[Li H Z. Global Properties of Simple Physical System——Berry's Phase and Other, Shanghai Science and Technology Publisher, 1998. Ch 7&9 (in Chinese)]
[12] Fetter A L, Walecka J D. Quantum Theory of Many Particle Systems. McGraw Hill, 1971