

量子绝热定理(II) : 近似和适用条件

李 华 钟

(中山大学高等学术研究中心 广州 510275)

摘 要 文章首先概述了近年国际文献中关于量子绝热近似和绝热条件的不自洽性的研究. 叙述了文献中关于绝热近似不自洽性的论证和争论. 然后引入文章作者的观点, 从不同于国外文献的角度出发指出应当正确地理解瞬时本征函数的相位问题, 从这个相位的正确处理, 得出结论 (1)MS 不自洽的存在, 不因计及几何相位而消除 (2)量子几何相位不自洽是不存在 (3)现时的标准的绝热近似条件不是充分条件.

关键词 量子绝热近似条件, 量子绝热近似不自洽, 量子几何相位

Quantum adiabatic theorem (II) : approximation and condition for application

LI Hua-Zhong

(*Advanced Research Center, Zhongshan (Su - Yat - Sen) University, Guangzhou 510275, China*)

Abstract Recent research on the quantum adiabatic theorem and the conditions for its application are briefly reviewed. The inconsistencies of the theorem and adiabatic approximation discussed in the recent literature are described. The author's points of view are presented in a way different from those in the current literature. The existence of the inconsistency is confirmed, while the consistency of the so-called vanishing quantum geometric phase is shown to be due to misunderstanding about the phase of the instantaneous eigenfunction of the Hamiltonian.

Keywords quantum adiabatic approximation, inconsistency of adiabatic approximation, quantum geometric phase

1 引言

绝热过程是物理系统的一个有着广泛的现实应用的过程, 它的研究在量子理论建立的初期起了重要的作用. 在量子力学建立后也有很广泛和重要的应用. 量子绝热定理自 1923 年建立以来, 至今 80 余年已经过许多研究和应用^[1]. 但是令人讶异的是直至最近(2004 年) 却有人发现, 一般教科书和应用文献上开出的量子绝热近似的适用条件存在很大的漏洞, 它并非普适可用, 它可能导致量子绝热定理不自洽的结果^[2]. 量子绝热定理和量子绝热近似是不应混淆的两个概念, 在本文作者的另一篇评述中^[1]已经强调阐说了. 最近的国际文献用具体计算证明通常的所谓标准的量子绝热近似条件, 不保证量子绝

热近似的成立. 这一发现引起了热烈的讨论^[3-7], 在应用这一近似时, 一般满足了标准的量子绝热条件, 并不意味着绝热定理就能够作为近似应用得到正确的结果. 相反地有时会导致不自洽和不正确的结果, 现行共识的量子绝热条件不是绝热近似的充足条件.

参考文献 2 [记为 MS) 是最先指出绝热近似引致不自洽, 其后, 文献 [3-7] 都作了重新分析和略有不同的推导. 文献 3 [用略有不同的推导宣称 MS 的不自洽性的出现是由于不恰当地处理瞬时本征态. 文献 4] 指出, 在文献 2] 推导中, 有关 Berry 相位的不正确的陈述, 文献 4] 作了分析和改正, 文献 2] 又宣称 MS 的不自洽性是可以化解的, 但却

2006 - 03 - 27 收到初稿 2006 - 09 - 12 收到修改稿

又存在另一种不自洽性,认为在严格的绝热条件下导致 Berry 几何相位为零.文献[5]用另一种推导方法证明 MS 不自洽性,原因是通常的量子绝热条件不是充分条件.这个不充足的条件不保证近似所要求的假设能满足.文献[6]指出文献[2]和文献[5]两种表述是等价的.文献[7]给出用微扰方法分析导致绝热近似条件的不充足性.与上列文献不同,文献[8—10]认为 MS 不自洽性实际上并不存在,只不过是由于 MS 在推导中的一个数学上的错误所致,与绝热定理和它的应用无关^[1].文献[11]宣称可以引入新的绝热近似充足条件.文献[6]也引入新的绝热近似条件,它是充足的,不会导致 MS 不自洽.

综合可见,关于绝热近似条件的争论有如下一些问题:

(1) 是否真正存在 MS 指出的不自洽性?这一不自洽是否可以被消除?

(2) 标准的量子绝热近似条件是否是绝热近似的充足条件?

(3) 除了 MS 不自洽之外,是否还存在量子几何相位的不自洽性?

以下各节我们讨论这些问题,并阐述本文作者的观点.

我们强调,量子绝热定理本身不存在问题,定理和近似概念上早已清楚^[8—11].近年来量子计算研究快速的进展,提出了基于量子绝热定理利用量子态绝热演化过程来完成量子搜索(quantum search)^[16].这使得在应用量子绝热定理时,操作量子绝热近似,正确运用近似的适用条件成为十分重要.

本文要说明上面所讲的新近“发现”及其引出的讨论,文献[2]等举出的例是具体显示了绝热定理和绝热近似及其有关概念的混淆能导致错误的物理理解.这对于量子力学的教学和应用的研 究都是很有意义.

2 量子绝热定理和量子绝热近似

绝热过程,量子绝热定理的陈述在许多量子力学的教科书都有详细的介绍^[12—15],有多种方式的陈述文字,又有不同严格程度的表述.我们引用的是来自经典量子力学教科书的陈述^[13],它不是数学上的严格表述,也没有全面地顾及定理先期要求的物理条件.但是已足够凸显我们要说的问题.

首先,明确一下“绝热”的含义^[1],如果系统和

环境之间不存在能量的交换,这个系统是孤立的系统,也自然是绝热的恒定系统,如果系统对于环境并不完全孤立,在系统受环境的影响下,系统的状态随时间变化,这时系统的时间演化过程,受含时间的哈密顿 $H(t)$ 所驱动.或表述为一组依赖时间的参数 $\lambda: \lambda_1(t)\lambda_2(t)\dots\lambda_n(t)\dots H(\lambda)$. 系统演化的绝热过程就是当这环境驱动缓慢(十分缓慢,足够缓慢,这些用词都时常被一些作者用到)时实现的状态的变化,这些用词可以公式表述为 $\frac{\partial \lambda}{\partial t} \approx 0, \frac{\partial H}{\partial t} \approx 0$. 式子中的符号 \approx 应理解为左端的量是一个无穷小量,其极限为零,但并不等于零,也不是一个有限大小的小量,这叫做绝热极限,量子绝热定理是在这个极限条件下成立的,如果 $\frac{\partial \lambda}{\partial t}$ 不是一个无穷小量而是一个有限小量 ε ,这时并不是极限的情形,量子绝热定理不是准确成立的,它还带有一些依赖 ε 大小的修正项,一般都忽略了这些修正,而应用绝热定理,这时的绝热定理就只是近似的,这时称为绝热近似,什么条件下可以忽略修正,这是绝热近似的适用条件.过去有些作者把这绝热近似的适用条件和绝热定理成立的条件看成等同,而不觉得有什么实际和计算上的错误,绝热近似条件看成是充足和必要条件,文献[2]指出这个通常认定的绝热近似条件并不是普适的,即使这个条件满足也并不保证绝热近似成立.即绝热定理删略了的修正项不一定可以忽略,这一点从概念上说完全可以理解,文献[1]已经着重指出绝热定理与绝热近似两者概念上的区别.文献[2]给出了具体的计算和一个存在的反例^[2],说明如果把这两者视为相同就产生文献[2]所说的“绝热定理之不自洽”.实际上文献[2]所指出的是当 ε 有限小,有时即使满足绝热条件,绝热近似也不能适用.对于绝热极限下成立的绝热定理是没有影响的.

量子绝热定理可以简单地陈述如下^[3]:在物理绝热过程中,系统所处的初态是 $H(t=0)$ 的本征态

- 1) 其实用其他方法推导也可得到 MS 的不自洽性,例如文献[4]表明不必用到文献[6]所批评的推导错误步骤也可得到 MS 结果.文献[4,5,7]用另一推导论证文献[2]的不自洽性.
- 2) 文献[1]投稿日期为2004年5月9日.该稿投出后,作者注意到文献[2],实际上文献[2]给出了文献[1]所阐说的区别绝热定理与绝热近似的重要性的例子.文献[1]已说明通常的“绝热条件” $|E_n - E_m| \ll \alpha(t) |H| n(t), m \neq n$,被认为是略去 $O\left(\frac{1}{\tau}\right)$ 量级的项的绝热近似最低阶次(绝热参数 ε 零阶)成立的条件.
- 3) 请参阅文献[1]

$|n(t=0)\rangle$ 从 $t=0$ 起, 系统随时间演化到 $t=T$ 时就处于末态为 $H(T)$ 的瞬时为 T 时的本征值的本征态 $|n(T)\rangle$, 末态波函数为

$$|\psi_n(T)\rangle = \exp\left[-i\int_0^T E(t/\tau)dt\right]|n(T)\rangle - O\left(\frac{1}{\tau}\right). \quad (1)$$

在绝热极限 $\tau \rightarrow \infty$ ($\tau = \frac{1}{\varepsilon}$) 下, $O\left(\frac{1}{\tau}\right) \rightarrow 0$,

$$|\psi_{\tau \rightarrow \infty}(T)\rangle = \exp\left[-i\int_0^T E(t/\tau)dt\right]|n(T)\rangle. \quad (2)$$

当绝热变化虽是缓慢但变化率仍然是有限的大小, 此时如略去 $O\left(\frac{1}{\tau}\right)$ 项便是绝热近似, 一般认为绝热近似成立的充分条件是

$$\frac{\left|n(t)\right|\left|\frac{\partial H}{\partial t}\right|m(t)}{|E_n - E_m|^2} \ll 1 \quad n \neq m, \quad (3)$$

此式为许多教科书所采用, 被称为量子绝热条件, 在此条件下, 量子绝热近似解为

$$|\psi(T)\rangle \cong \exp\left[-i\int_0^T E(t)dt\right]|n(T)\rangle. \quad (4)$$

从文献 [1] 我们认为, 区别于绝热近似, 绝热极限 $\frac{d\lambda}{dt} \rightarrow 0$ 是量子绝热定理成立的充足条件. 最新的文献 [2] 提出需要注意之处, 即通常所谓的绝热条件

$|E_n E_m| / |E_n - E_m| \ll 1$ ($n \neq m$), 并不保证绝热定理一定成立. 这个条件因而也不足以保证可以把量子绝热定理视作为绝热近似, 这个条件也不是绝热近似的充足条件.

3 量子绝热近似条件的不自洽性

绝热过程演化系统的薛定谔方程为

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle \quad (5)$$

(用 $\hbar=1$ 自然单位), 设 H 的本征值谱是完全分立并且无简并的. $H(t)$ 含时间, 本来没有定态能谱, 但假如 $H(t)$ 是缓变, 则可以定义它的瞬时本征态(参看文献 [1]):

$$H(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle, \quad (6)$$

设系统在初始时间 t_0 处于 H 的某一定瞬时本征态为 $|E_0(t_0)\rangle$, 它随时间演化由演化算子描述, 可以表述为由么正算子 $U(t, t_0)$ 的作用:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|E_0(t_0)\rangle, \quad (7)$$

$$U(t, t_0) = T\exp\left(-i\int_{t_0}^t H(t')dt'\right). \quad (8)$$

绝热定理在无限缓慢的绝热极限情形下给出(5)式的解 ($d\lambda/dt \rightarrow 0$, 见文献 [1]):

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left[-i\int_{t_0}^t E_0(t')dt'\right]|E_0(t)\rangle. \quad (9)$$

如果过程是巡回(cyclic)过程,

$$|\psi(T)\rangle = \exp\left[-i\int_{t_0}^{t_0+T} E_0(t')dt'\right]e^{i\beta_{oc}}|E_0(t_0+T)\rangle, \quad (10)$$

T 是由 t_0 开始演化一个巡回后的时间,

$$\beta_{oc} = \oint E_0(t') \left| \frac{d}{dt} E_0(t') \right| dt', \quad (11)$$

β_{oc} 是所谓几何相位, 当不是巡回过程时, β_0 是一个普通相位, 没有物理意义, 由于(6)式决定 $|E_0(t)\rangle$ 到一个任意相位, 可以由 $|E_0(t)\rangle$ 的相位变换消去(见下面(23)(24)式叙述)(9)式也是(5)式的绝热解, 当过程不是巡回又不在绝热极限, 即如果 $d\lambda/dt$ 是有限小的量时, 保留 $e^{i\beta_0}$,

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left[-i\int_{t_0}^t E_0(t')dt'\right]e^{i\beta_0}|E_0(t)\rangle, \quad (12)$$

$$\beta_0 = \int_0^t E_0(t') \left| \frac{d}{dt} E_0(t') \right| dt'. \quad (13)$$

这里 β_0 不是几何相位, 它早在 Schiff 的量子力学教科书中讲过, 在 Lewis 和 Riesenfeld 的不变量方法解薛定谔方程时导出过^[8, 11], 到 Berry 认识到当巡回过程时, 它显示在一个巡回后波函数取得一个相位(11)式, 这个不是任意的, 是有物理意义并可观测的几何相位. 把它保留下来是十分重要的. 对于非巡回过程, 可以把 $e^{i\beta_0}$ (可以)不写出.

MS^[2]认为, 他们证明了, 如果认为满足条件(3)式就能导出绝热定理或绝热近似下的(12)式的话, 那就意味着存在下面关系式:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left[-i\int_{t_0}^t E_0(t')dt'\right]|E_0(t_0)\rangle, \quad (14)$$

然后由

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= U(t, t_0)|E_0(t_0)\rangle \\ &= \exp\left[-i\int_{t_0}^t E_0(t')dt'\right]|E_0(t)\rangle \end{aligned} \quad (15)$$

得

$$E_0(t_0)|U^{\dagger}U|E_0(t_0)\rangle = E_0(t)|E(t)\rangle. \quad (16)$$

按么正性, 规一化左端 = 1, 但右端 $\neq 1$, 因而(12), (14)(15)式不自洽. 以上是形式推导得到的结论, 未具体解说这个不自洽结果的原因. MS 认为这

是由于作为绝热近似的(4)式略去了本来不应该略去的项 $O\left(\frac{1}{\tau}\right)$. 一般以为绝热近似条件(3)式足以保证 $O\left(\frac{1}{\tau}\right)$ 项可以略去,但 MS 用以下推演表明,事实上并非如此.

假设一个么正变换

$$U_{AT}(t, t_0) = \sum_n e^{-i \int_{t_0}^t K_{nn'} dt'} |E_n(t) \rangle \langle E_n(t_0)|, \quad (17)$$

这个么正算子就是绝热过程的演化算子,它作用于 t_0 初态,就得到 t 时末态(4)式).

在此么正变换作用下,

$$H \rightarrow \bar{H} = -U_{AT}^+ H(t) U_{AT} = -i U_{AT}^+ \dot{U}_{AT} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \bar{H} = & - \sum_n E_n(t) |E_n(t_0) \rangle \langle E_n(t_0)| \\ & - i \sum_n e^{i(E_n - E_m)t} E_n(t) |\dot{E}_m(t) \rangle \langle E_n(t_0) \rangle \langle E_m(t_0)|. \end{aligned} \quad (19)$$

通常认为,满足了绝热近似条件(3)式,上式的第二项是含有快速振动指数因子,当 T 大时,平均效果可以视为零因子而略去此项,绝热近似就是略去与(19)式第二项有相同结构的项,成为

$$\bar{H} \cong - \sum_n E_n(t) |E_n(t_0) \rangle \langle E_n(t_0)|. \quad (20)$$

这个 \bar{H} 导致(14)式,因而导致上述不自洽性,可见不自洽的原因来自略去(19)式第二项,亦即表示条件(3)式并不保证绝热近似正确自洽. MS 论证(19)式第二项实际不是快速振动,不可略去.

MS 原文的推导^[2]受到一些批评^[6,7],我们此处所作的简化阐述,是参照文献[5]避去了受质疑的步骤,但是仍然存在令人疑惑之处.例如把瞬时成立的本征函数式推引出应用于全过程的类似薛定谔方程,然后将它求解.从这步骤导致不自洽的结果,正是这个步骤将瞬时参数 t 无端改变为动力自变量建立方程的做法是成问题的一步.虽然文献[2]中的推导存在问题,但是仍然有文献[5]用另外的方法论证 MS 不自洽性确定存在,其原因是绝热近似条件(3)式并不是充足条件,也就是说,即使满足了这个条件,也并不保证绝热近似式正确成立.可以说,现时文献倾向 MS 不自洽的结论是正确的.下节讨论这一问题.

4 绝热近似条件并不是绝热近似的充足条件

在讨论 MS 不自洽性问题时,要区分绝热定理和绝热近似^[1].绝热定理是过程缓慢的变化率 ε 是无穷小量,绝热近似是变化 ε 虽小,但是有限大小.它与绝热定理差别在于末态波函数一个修正量级为 ε 的一项,当应用绝热近似时,把这一项略去,因此波函数的表式和绝热定理的末态波函数表式一样,以致一般不从概念上加以区别.从这个观点来看,应该明确所谓 MS 不自洽性问题不是出在绝热定理,而是在绝热近似.

从物理的观点上看,绝热定理陈述的是当绝热过程的全时间足够长,而在此时间间隔内,系统的哈密顿量的变化很小,以致哈密顿量几乎没有变化,因而初态在某一瞬时本征态时,以后在过程全时间内,系统遵循留在各个瞬时本征态上,末态也就是过程相应末端时间的瞬时本征态.这是合理的情况,绝热近似下,系统有很小的变化率的效果,可以在过程时间内导致对相邻近的本征态的跃迁有限的几率.因此绝热近似成立需要略去哈密顿的非对角元素,以禁止跃迁,这哈密顿的矩阵是在 $H(t)$ 的瞬时本征态为基矢的表象下的矩阵,这个条件看来也是合理的.但仔细分析它并非充分条件^[5],设想某二能级系统的哈密顿写成 $H = H_0 + H'$, H' 为微扰部分,它的强度虽小,但是它的快速周期振荡频率与 H_0 的周期变化频率共振.如果 H' 作用的时间够长, H' 的效果不断地积累,以致它的一次作用强度很小,相对于 H_0 是一种微扰,但积累一定时间,可以驱动系统从 H_0 的一个能级跃迁到另一能级,产生两能级间的跃迁,这时绝热近似显然不正确,但(3)式依然是满足了的,因为只需要微扰 H' 作用够弱,这样所谓绝热近似条件,并不保证绝热近似(4)式的成立.

我们注意,这个论点并不影响绝热定理,因为区分绝热定理与绝热近似时,绝热定理的充分条件是无穷小的缓慢变化的绝热极限,排除快速的周期率化,为证明这个物理理念^[5],假设两个物理系统(a)(b),它们的哈密顿彼此以一个么正变换联系 $U^a(t)$:

$$H^b(t) = -U^{a'}(t) H^a(t) U^a(t), \quad (21)$$

$U^a(t)$ 是系统(a)的演化算子,系统(a),系统(b)都满足绝热近似条件(3)式;文献[5]证明,对于系统(a),绝热近似是正确的,而对于系统(b),绝热近似未必成立,虽然两者满足相同的绝热近似条件,但两者的绝热近似解却并不同时成立,因此绝热近似条件并非充足条件,它不保证绝热近似的正确成立.在本文引述的有关参考文献中,大都举出一些具体

的例证,例如自旋为 $\frac{1}{2}$ 的磁子在转动的磁场中的运动这类经典的系统,读者可参阅引文文献[2—5]。

5 绝热定理和相位不自洽

哈密顿为 $H(t)$ 的瞬时本征方程(6)式,只能决定 $|n(t)\rangle$ 到一个不定的相因子 $H(t)$ 不含对 t 的微商算子, $|n(t)\rangle$ 和 $e^{i\gamma_n(t)}|n(t)\rangle$ 同样满足本征方程(6)式,同样是 $H(t)$ 的瞬时本征函数。对于这个不定相位,看来参考文献存在一些含糊和误解,由于这些误解导致从量子绝热近似的不自洽性引出量子几何相位的不自洽性^[3—5]。我们先讨论本征函数相位的一种习惯约定^[8,11],详细讨论请参阅文献[8,11]。

薛定谔方程的一般解写成

$$\psi(x,t) = \sum_n a_n(t) u_n(x,t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'\right), \quad (22)$$

在这线性叠合中 $u_n(x,t)$ 的相位须有一规定,有物理意义的是两项间的干涉,是两项的相位差。事实上,量子力学建立后,在Berry以前,人们对选定函数 $u_n(x,t)$ 的相位问题,早有一个习惯性的如下约定^[8,11]:设对 $u_n(x,t)$,有

$$\chi(t) = i \int n | \dot{n} dt \quad (n | \dot{n} = \int u_n^* \frac{\partial}{\partial t} u_n d^3x) \quad (23)$$

作了上述选定后,新的本征函数(由于瞬时本征方程(6)式有一个任意常数相位的不确定性,这使我们总可以添加如下相因子,以选择新的本征函数)

$$u'_n(x,t) = e^{i\chi_n(t)} u_n(x,t)$$

的相位便确定为零了,因为这等于约定了新本征函数的相位,使它们总是满足

$$\gamma'_n(t) = i \int n' | \dot{n}' dt = 0, \quad n' | \dot{n}' = 0 \quad (24)$$

这约定使一套本征函数 $u'_n(x,t)$ 的相位恒固定取为零,这种取定是一种习惯约定,因为人们认为这并没有任何引入额外的物理可观察的效果。一次定义了全套本征函数的相位,约定予以最简单的零相位,Berry以前的几十年来人们遵循这一约定。

我们在本文第2.3.4节中的瞬时本征函数,都假定采用了上述的相位惯例,特别是在(4)(9),(12)式绝热过程的末态波函数的式子中,没有一个

待定的相位因子 $e^{i\chi(t)}$ 。这点同文献[2—5]不同,他们在相应的式子中明确地写出一个据称是Berry相位因子 $e^{i\chi_n(t)}$,例如:

$$|\psi(t)\rangle \approx \exp\left[-i \int E_n(t') dt'\right] e^{i\chi_n(t)} |n(t)\rangle. \quad (25)$$

从我们在本节开始的分析中知道,对于非巡回过程 $e^{i\chi_n(t)}$,这个因子可以并入 $|n(t)\rangle$ 的相位中去,它不是Berry相位因子,只有对于巡回过程,在一个过程演化一个巡回之末态波函数的末态波函数才可能有一个非平庸的几何相位因子 $\gamma_n(c)$ ^[4]:

$$|\psi(T)\rangle = \exp\left[i \int_{t_0}^{t_0+T} E_n(t') dt'\right] e^{i\gamma_n(T)} |n(t_0)\rangle. \quad (26)$$

从以上分析看出,当这个相位按照惯例选定后对于非巡回过程的绝热定理和绝热近似时(4)(9),(12)式中没有必要保留一个 β_0 的相位因子。它可以被归并入瞬时本征函数的相位中去,它对绝热定理和绝热近似以至MS不自洽性等都没有关系。对于巡回过程而言(10)式中 $e^{i\beta_0}$ 的出现,它的取值是过程经过一个巡回后才出现的末态相位,从微分几何的矢量平行移动的观点来看,几何相位就清楚地表明量子几何相位是依赖于整个巡回过程,而不是一个瞬时取值的时间函数。它是属于局域地无显出效应,而在过程整体渡过之末出现的整体效应,它的相位因子是不可积的相位因子,因此不可以把它归入于本征函数的不定相位因子之列。平行移动的态矢可以看成是本征态矢,也可以看成是波函数态矢,但两者只能取其一。如果用了平行移动 $|n(t)\rangle$ 的结果:

$$n(o) | n(\tau) = e^{i\chi(c)}, \quad (27)$$

则(4)(9)(12)式不应明显写出 $e^{i\beta_0}$ 因子,如在式中明显写出这个 $e^{i\beta_0}$ 因子,则在后来推导中不应再用(27)式。

从以上的论述看来,非巡回过程^[2]中的 $e^{i\beta_0}$ 没有保留必要,它可以被吸收到本征函数的不定相位,用重新定义而消去,文献[4]中,一方面它的(1)式保留了相位 $\chi(t)$ 以利用它去消除不自洽性,另一方

4) 非巡回过程的几何相位问题,按照一般共识的定义^[13]也是通过闭合的巡回路径来定义,这闭合路径在投射希尔伯特空间,利用于此空间的测地线来补足开路端点而成为一巡回闭路,本文不拟涉及到这种几何相位的讨论,这并不影响本文的主旨问题讨论。

面,文献[4]在推导(9)式时又用了(27)式,这样就双重引入 $\gamma_n(t)$ 二次,因而是错误的.如果舍弃了文献[4]中的(1)式中的 $\gamma_n(t)$,则(15)式可写为

$$\begin{aligned} \bar{\psi}(t) | \bar{\psi}(t) &\approx n(0) | n(t) \\ &= e^{-i\gamma_n(t)} n(0) | n(0) = e^{-i\gamma_n(t)} \neq 1. \end{aligned}$$

由于引用绝热近似导致过程么正性破坏,即MS的不自洽性并不能被消除.

与此同时,文献[4]中导致量子几何相位 Berry 相位为零的论证也无效,因为对巡回过程本征态矢从初始时刻到巡回末态产生的几何相位因子,本身就是态矢平行移动一周所产生的

$$\begin{aligned} n(0) | n(T) &= e^{i\chi(T)} \psi(0) | \psi(T) \\ &= \exp(i\delta_n(T)) n(0) | n(T) \\ &= \exp(i\delta_n(T)) \exp^{i\chi(T)}, \end{aligned}$$

$\chi(T)$ 并没有被抵消掉,因此MS不自洽性存在,几何相位不自洽性并不存在.

我们在本文引言中提出了在国际文献上近年关于量子绝热近似的争论的三个问题.经过以上几节的讨论,对这三个问题,国际期刊上发表的文献并不一致.本文作为一种独立的见解,并没有完全同意或完全不同意文献上的几种分歧意见,我们从另一观点回答是:

(1)MS不自洽性是存在的,不因为计及几何相位而清除.

(2)一般教科书上标准的量子绝热条件并不是绝热近似的充足条件.

(3)所谓由量子绝热近似条件引致的量子几何相位的不自洽并不存在.

量子绝热近似的条件写入通行国际的教科书,有至少50年的历史了.最近研究对它的否定当然还需时日,以经历许多研究者的琢磨和考验.另一方面,能否找到绝热近似成立的充足条件,这还是一个

敞开的问题,文献[5]考察了现今文献上其他形式的绝热近似条件,可是这些其他形式表述的条件,仍然都不是充分条件,人们正期待找到正确的量子绝热近似的定量的充分条件,当前应用量子绝热近似就需要小心谨慎.

参 考 文 献

- [1] 李华钟. 物理 2005, 34(6): 419
- [2] Marzlin K P, Sanders B C. Phys. Rev. Lett. 2004, 93: 160408; Phys. Rev. Lett. 2006, 97: 128903
- [3] Sarandy *et al.* 2004, V2, quant-ph/0405059
- [4] Pati A, Rajagopal A K. 2005, quant-ph/0405129
- [5] Tong D M *et al.* quant-ph/0406163; Phys. Rev. Lett. 2005, 98: 110407
- [6] Duki S, Mathur H, Narayan O. 2006, V2, Quant-ph/0510132; Phys. Rev. Lett. 2006, 97: 128901
- [7] Verlesi T, Englman R. Phys. Lett. A 2006, 353: 11
- [8] Wu Z, Zheng L, Yang H. 2005, quant-ph/0411212
- [9] Wu Z, Yang H. 2004, V2, quant-ph/0410118; Phys. Rev. A, 2005, 73: 012114
- [10] Ma J, Zhang Y, Wang E *et al.* Phys. Rev. Lett. 2006, 97: 128902
- [11] Ye M Y, Zhou X F, Zhang Y S *et al.* 2005, quant-ph/0509083
- [12] Schiff L I. Quantum Mechanics(3rd). Ed. McGraw Hill N. Y., 1968; Bohm D. Quantum Theory. Prentice Hall Inc. N. Y., 1957
- [13] Messiah A. Quantum Mechanics. North-Holland, Amsterdam, 1962
- [14] Landau L D, Lifshitz E M. Mechanics(3rd). Ed. Pergamon, Oxford
- [15] 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, §7.9
- [16] Farhi E, Goldstone J, Gutmann S *et al.* quant-ph/0001106
- [17] Samuel J, Bhandari R. Phys. Rev. Lett. , 1988, 60: 2339