第24卷 第12期　　高 能 物 理 与 核 物 理　　Vol.24, No.12
2000年12月　　HIGH ENERGY PHYSICS AND NUCLEAR PHYSICS　　Dec., 2000

Berry 几何相与量子跃迁*

张忠灿　方祯云　胡陈果　孙世军
(重庆大学理学院物理系　重庆　400044)

摘要　针对Berry几何相的出现所关联的量子能级,微弱变化跃迁的物理背景条件进行分析研究;对严格产生(获得)Berry几何相与这种微弱变化跃迁之间的内在关系作进一步探讨. 结果表明:Berry几何相的严格产生都是由系统在演变过程中所出现的量子能级微弱变化跃迁的绝热极限效应所必然导致的结果.

关键词　Berry　几何相　量子跃迁　绝热近似　绝热极限

1　引言

几何位相(称为Berry几何相)[1]的存在已在核物理[2]、原子分子物理[3]、光学[4]、固体物理学[5]中获得了实验验证;而Berry几何相所具有的理论价值与意义,也在物理学科的许多研究领域中不断体现出来[6]. 至今Berry几何相仍然是现代物理学前沿科学研究中的热点之一. 然而,Berry几何相的最初预言,来自Berry从绝热近似角度所作的研究. 他采用无量子能级微弱变化跃迁的近似演变态作为理论推导的基础,从中获得了Berry几何相的理论表述基本公式[1]. 但从理论上严格解释Berry几何相的存在问题,则需要采用严格演变态作为理论分析与推导的基础. 我们对此进行分析研究后指出:Berry几何相的严格产生,都是由量子跃迁趋于无限微弱,而并非等同于量子跃迁不存在或不起作用时所必然导致的极限演变结果.

2　Berry几何相中潜在的量子跃迁

Berry几何相的理论表述基本公式为[1]

$$\gamma_n(C) = \mathrm{i}\oint_C \langle n(\boldsymbol{R}) \mid \nabla_{\boldsymbol{R}} \mid n(\boldsymbol{R})\rangle \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{R}, \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{R}(t), 0\leqslant t\leqslant T$; T 为演变周期, C 为参数 $\boldsymbol{R}$ 空间中的闭合曲线,而 $|n(\boldsymbol{R})\rangle = |n(\boldsymbol{R}(t))\rangle$; $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{R}(t)|_{0\leqslant t\leqslant T}$ 且满足瞬时能量本征方程

1999-10-08收稿,2000-03-07收修改稿
*国家自然科学基金资助(19835040)

$$\hat{H}(\boldsymbol{R}(t))\cdot|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle = E_n(\boldsymbol{R}(t))|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle.$$

与公式(1)等价的另一种表述公式为

$$\gamma_n(T) = \mathrm{i}\int_0^T \langle n(\boldsymbol{R}((t))|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle\cdot \mathrm{d}t. \tag{3}$$

Berry 从绝热近似角度采用同一能级上的演变态$|\psi(t)\rangle$[1]推导出(1)式或(3)式:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E_n(\boldsymbol{R}(t'))\cdot \mathrm{d}t'\right\}\cdot \exp\{\mathrm{i}\gamma_n(t)\}\cdot|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle;\gamma_n(0)=0, \tag{4a}$$

其中

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(\boldsymbol{R}(t))\cdot|\psi(t)\rangle, \tag{4b}$$

$$\hat{H}(\boldsymbol{R}(t))\cdot|\psi(t)\rangle = E_n(\boldsymbol{R}(t))\cdot|\psi(t)\rangle. \tag{4c}$$

(4a)式经循环演变一周($0\leq t\leq T$)后,cyclic 条件被严格满足:

$$|\psi(T)\rangle = \exp\{\mathrm{i}\alpha_n(T)\}\cdot|\psi(0)\rangle, \tag{5a}$$

$$\alpha_n(T) = d_n(T)+\gamma_n(T), \tag{5b}$$

$|\psi(0)\rangle = |n(\boldsymbol{R}(0))\rangle = |n(\boldsymbol{R}(T))\rangle, d_n(T) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^T E_n(\boldsymbol{R}(t))\cdot \mathrm{d}t, \gamma_n(T)$即为 $\gamma_n(C)$.

为得到 $\gamma_n(T)$或 $\gamma_n(C)$的具体表述形式,Berry 将(4a)式代入(4b)式,导出了 $\gamma_n(t)$满足的积分表述形式

$$\gamma_n(t) = \mathrm{i}\int_0^t \langle n(\boldsymbol{R}(t'))\left|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}\right|n(\boldsymbol{R}(t'))\rangle \mathrm{d}t' \tag{6}$$

(6)式在 $t=T$ 时正好就是 Berry 公式(3)式或(1)式.

然而,演变态(4a)式毕竟是一个未考虑量子跃迁的近似演变态. 因为,由演变态(4a)式所获得的这个位相 $\gamma_n(T)$或 $\gamma_n(C)$为 $2k\pi$,(k 为整数),即无实质意义. 这个近似演变态是来自考虑量子跃迁的严格演变态 $|\Psi(t)\rangle = \sum_m C_m(t)|m(\boldsymbol{R}(t))\rangle$[7]的绝热极限. 对此,可作如下解释说明:

首先,可以将此严格演变态$|\Psi(t)\rangle$表成如下形式:

$$|\Psi(t)\rangle = |\psi(t)\rangle + \Delta(|\psi(t)\rangle), \tag{7a}$$

其中 $\Delta(|\psi(t)\rangle) = |\Psi(t)\rangle - |\psi(t)\rangle$为两演变态之偏差,且还可表为

$$\Delta(|\psi(t)\rangle) = \sum_m \varepsilon_m(t)|m(\boldsymbol{R}(t))\rangle, \tag{7b}$$

其中 $\varepsilon_m(t) = \langle m(\boldsymbol{R}(t))|\Psi(t)\rangle - \delta_{mn}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E_n(\boldsymbol{R}(t'))\mathrm{d}t'\right\}\exp\{\mathrm{i}\gamma_n(t)\}$. 显然,当$|\Psi(0)\rangle = |n(\boldsymbol{R}(0))\rangle$时,$\varepsilon_k(t) = \langle k(\boldsymbol{R}(t))|\Psi(t)\rangle = \langle k(\boldsymbol{R}(t))|\hat{U}(t,0)|\Psi(0)\rangle$;($k\neq n$)为系统经 $0\to t$ 演变后,由$|n(\boldsymbol{R}(0))\rangle$态或 $E_n(\boldsymbol{R}(0))$能级跃迁到$|k(\boldsymbol{R}(t))\rangle$态或 $E_k(\boldsymbol{R}(t))$能级上的几率幅,而当系统作足够缓慢演变($T\gg1$)时,此跃迁几率 $\rho_{n\to k}(t) = |\varepsilon_k(t)|^2\ll1$,并非为零.

当系统作一种理想模式的演变,即无限缓慢的极限演变($T\to+\infty$)时,由于各跃迁几率 $\rho_{n\to k}(t)\to0$,因而,$\varepsilon_k(t)\to0$;($k\neq n$),此时,也将导致 $\varepsilon_n(t)\to0$,于是,将获得如下极限演变关系:

$$|\psi(t)\rangle = \lim_{T\to+\infty} |\Psi(t)\rangle, \tag{8a}$$

其中偏差$\Delta(|\psi(t)\rangle)\to 0$.

以上论述表明,只有当系统作无限缓慢的极限演变($T\to+\infty$)的理想情形时,演变态$|\psi(t)\rangle$才是严格演变态$|\Psi(t)\rangle$的绝热极限;而对于系统作任何足够缓慢的有限演变($T\gg 1$)时,不存在量子跃迁的演变态$|\psi(t)\rangle$将永远只能是存在量子跃迁的严格演变态$|\Psi(t)\rangle$的近似:

$$|\psi(t)\rangle \underset{(T\gg 1)}{\approx} |\Psi(t)\rangle, \tag{8b}$$

其中偏差$\Delta(|\psi(t)\rangle)\sim 0$,但不为零. (8a),(8b)两式暗示了Berry几何相存在着潜在的绝热极限意义,对此,可作进一步阐述.

将(7a)和(7b)式代入Schrödinger方程,经推导后得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\varepsilon_n(t) + \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E_n(\boldsymbol{R}(t'))\mathrm{d}t'\right\}\exp\{\mathrm{i}\gamma_n(t)\}\right) +$$
$$\left(\varepsilon_n(t) + \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E_n(\boldsymbol{R}(t'))\mathrm{d}t'\right\}\exp\{\mathrm{i}\gamma_n(t)\}\right),$$
$$\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n(\boldsymbol{R}(t)) + \langle n(\boldsymbol{R}(t)) \mid \dot{n}(\boldsymbol{R}(t))\rangle\right] + \sum_{k(\neq n)}\varepsilon_k(t)\langle n(\boldsymbol{R}(t)) \mid k(\boldsymbol{R}(t))\rangle = 0.$$

若令

$$C_n(t) = \langle n(\boldsymbol{R}(t)) \mid \Psi(t)\rangle = \varepsilon_n(t) + \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E_n(\boldsymbol{R}(t'))\mathrm{d}t'\right\}\exp\{\mathrm{i}\gamma_n(t)\}, \tag{10}$$

则(9)式可表示为

$$\int_0^t \frac{\dot{C}_n(t')}{C_n(t')}\mathrm{d}t' = \int_0^t\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n(\boldsymbol{R}(t')) - \langle n(\boldsymbol{R}(t')) \mid \dot{n}(\boldsymbol{R}(t'))\rangle\right]\cdot \mathrm{d}t +$$
$$\left[-\sum_{k(\neq n)}\int_0^t \frac{\varepsilon_k(t')}{C_n(t')}\cdot\langle n(\boldsymbol{R}(t')) \mid k(\boldsymbol{R}(t'))\rangle\cdot \mathrm{d}t'\right], \tag{11}$$

完成(11)式左端的积分便得出(10)式的另一表述关系式

$$C_n(t) = \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E_n(\boldsymbol{R}(t'))\mathrm{d}t'\right\}\exp\left\{-\int_0^t\langle n(\boldsymbol{R}(t')) \mid \dot{n}(\boldsymbol{R}(t'))\rangle \mathrm{d}t'\right\}\cdot$$
$$\exp\left\{-\sum_{k(\neq n)}\int_0^t \frac{\varepsilon_k(t')}{C_n(t')}\langle n(\boldsymbol{R}(t')) \mid k(\boldsymbol{R}(t'))\rangle \mathrm{d}t'\right\}; C_n(0) = 1. \tag{12}$$

将(10)式代入(12)式中,得到$\exp\{\mathrm{i}\gamma_n(t)\}$满足的迭代关系

$$\exp\{\mathrm{i}\gamma_n(t)\} = \exp\left\{-\int_0^t\langle n(\boldsymbol{R}(t')) \mid \dot{n}(\boldsymbol{R}(t'))\rangle \mathrm{d}t'\right\},$$
$$\exp\left\{-\sum_{k(\neq n)}\int_0^t\left[\varepsilon_k(t')\cdot\langle n(\boldsymbol{R}(t')) \mid k(\boldsymbol{R}(t'))\rangle\cdot\left(\varepsilon_n(t') + \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^{t'}E_n\right.\right.\right.$$
$$\left.\left.\left.(\boldsymbol{R}(t''))\mathrm{d}t''\right\}\cdot\exp\{\mathrm{i}\gamma_n(t')\}\right)^{-1}\right]\cdot \mathrm{d}t'\right\} - \varepsilon_n(t)\cdot\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t E_n(\boldsymbol{R}(t'))\mathrm{d}t'\right\}. \tag{13}$$

考察系统作无限缓慢的极限演变. 对于任何一个演变时间段$[0,t]$——$0\leqslant t'\leqslant t$,均满足:$\varepsilon_k(t')\to 0$;$(k\neq n)$和$\varepsilon_n(t')\to 0$;可从(13)式中得到下述极限演变关系:(13)式左边的指数函数趋于右边第一项指数函数,或表述成

$$\gamma_n(t) \xrightarrow[(T \to +\infty)]{} \mathrm{i} \cdot \int_0^t \langle n(\boldsymbol{R}(t')) \left| \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'} \right| n(\boldsymbol{R}(t')) \rangle \cdot \mathrm{d}t' \tag{14}$$

比较(6)式和(14)式可看出:Berry 从绝热近似角度,即忽略掉量子跃迁而导出的位相函数 $\gamma_n(t)$满足的(6)式[1],在严格意义下是必须考虑量子跃迁并作相关推导后得到的一种极限演变关系式(14),因而,由(6)式令 $t = T$ 而获得的 $\gamma_n(T)$或 $\gamma_n(C)$的积分表述形式,即 Berry 公式(3)或(1)也应包含这种潜在的极限意义. 这就是说,Berry 公式(3)或(1)的物理背景条件是必须存在量子跃迁.

但值得注意的是,要从演变态$|\Psi(t)\rangle$中严格产生(获得)Berry 几何位相 $\gamma_n(C)$,还必须要求$|\Psi(t)\rangle$作无限缓慢的极限演变($T \to +\infty$). 对于此理想演变情形,量子跃迁必将趋于零. 然而,就实际演变来讲,是不可能做到作无限缓慢的极限演变($T \to +\infty$)的,但却可以做到作足够缓慢的有限演变($T \gg 1$). 此时,量子跃迁将变得非常小,但却并非为零. 而正是这种十分微弱的量子跃迁,才构成了产生实质意义的 Berry 几何相的动力学因素[8]. 对此,作如下说明:

(1)若不存在十分微弱的量子跃迁,则必然导致在能量本征态矢的瞬时变化率中,不会产生出其他能量本征态矢,即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \mid n(\boldsymbol{R}(t))\rangle = \sum_k F_{kn}(t) \mid k(\boldsymbol{R}(t))\rangle, \tag{15a}$$

$$\text{若 } \varepsilon_k(t) = 0, (k \neq n), \text{则 } F_{kn}(t) = 0. \tag{15b}$$

其中 $F_{kn}(t) = \langle k(\boldsymbol{R}(t)) \left| \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \right| n(\boldsymbol{R}(t))\rangle$. 因(15a)式显然成立,下面只须说明(15b)式也成立:

将(7a)和(7b)式代入 Schrödinger 方程后,经推导可得出

$$\begin{aligned} &\langle n(\boldsymbol{R}(t)) \mid \Psi(t)\rangle \langle k(\boldsymbol{R}(t)) \left| \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \right| n(\boldsymbol{R}(t))\rangle = \\ &- \dot{\varepsilon}_k(t) - \varepsilon_k(t) \cdot \left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar} E_n(\boldsymbol{R}(t)) + \langle k(\boldsymbol{R}(t)) \left| \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \right| k(\boldsymbol{R}(t))\rangle \right] - \\ &\sum_{k'(\neq n, k)} \varepsilon_{k'}(t) \cdot \langle k(\boldsymbol{R}(t)) \left| \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \right| k'(\boldsymbol{R}(t))\rangle, \end{aligned} \tag{16}$$

其中 $k \neq n$, $\langle n(\boldsymbol{R}(t) \mid \Psi(t)\rangle \neq 0$. 若 $\varepsilon_k(t) = 0, (k \neq n)$,则由(16)式必然会导出其左边的后一个矩阵元为零,亦即 $F_{kn}(t) = 0, (k \neq n)$.

(2)当(15a)和(15b)式成立时,则不会出现实质意义的 Berry 几何相 $\gamma_n(C)$. 这是因为按(15b)可导出微分方程(15a)的解为

$$\mid n(\boldsymbol{R}(t))\rangle = \exp\left\{\int_0^t F_{nn}(t')\mathrm{d}t'\right\} \mid n(\boldsymbol{R}(0))\rangle. \tag{17}$$

考虑 $t = T$ 并注意到$|n(\boldsymbol{R}(T))\rangle = |n(\boldsymbol{R}(0))\rangle$,便从(17)式中得出其右边的指数函数值为 1,相角为 $2k\pi$;即 $\gamma_n(T)$或 $\gamma_n(C)$为 $2k\pi$;(k 为整数).

3 量子跃迁存在与否将导致 Berry 几何相存在与否的实例计算说明

3.1 实例Ⅰ在定向周期变化磁场中的运动电子

$$\hat{H}(t)=\mu_e\cdot B\cdot\cos\omega t\begin{bmatrix}\cos\alpha_3 & \cos\alpha_1-\mathrm{i}\cos\alpha_2\\ \cos\alpha_1+\mathrm{i}\cos\alpha_2 & -\cos\alpha_3\end{bmatrix},\tag{18}$$

其中,$B,\omega,\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3$ 均为常数 $\mu_e=\dfrac{e\hbar}{2m_ec}$,而瞬时能量本征值和相应的本征态为

$$E_1(t)=\mu_e\cdot B\cdot\cos\omega t,\quad \psi_1(t)\rangle=\sqrt{\frac{1+\cos\alpha_3}{2}}\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1(t)}\\ \dfrac{\cos\alpha_1+\mathrm{i}\cos\alpha_2}{1+\cos\alpha_3}\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1(t)}\end{bmatrix},$$

$$E_2(t)=-\mu_e\cdot B\cdot\cos\omega t,\ |\psi_2(t)\rangle=\sqrt{\frac{1-\cos\alpha_3}{2}}\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2(t)}\\ -\dfrac{\cos\alpha_1+\mathrm{i}\cos\alpha_2}{1-\cos\alpha_3}\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2(t)}\end{bmatrix},\tag{19}$$

其中 $\phi_1(T)=\phi_1(0),\phi_2(T)=\phi_2(0)$,($T=2\pi/\omega$ 为周期),以保证选择的本征态应满足周期条件要求. 作为范例,研究作足够缓慢演变的严格演变态:$|\Psi(t)\rangle$,其中 $|\Psi(0)\rangle=|\psi_1(0)\rangle$,$0\leqslant t\leqslant T$,$(T\gg1)$. 可以确定

$$F_{21}(t)=\langle\psi_2(t)\left|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right|\psi_1(t)\rangle=\mathrm{i}\dot{\phi}_1(t)\langle\psi_2(t)\mid\psi_1(t)\rangle\equiv0,(0\leqslant t\leqslant T)\tag{20}$$

因而,不存在 Berry 几何相. 利用 Berry 公式(3)也可得出同样结果:

$$\gamma_1(C)=\mathrm{i}\int_0^T\langle\psi_1(t)\left|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right|\psi_1(t)\rangle\cdot\mathrm{d}t=\mathrm{i}\int_0^T[\mathrm{i}\dot{\phi}_1(t)\cdot\langle\psi_1(t)\mid\psi_1(t)\rangle]\cdot\mathrm{d}t=0.\tag{21}$$

本范例中,严格演变态 $|\Psi(t)\rangle$ 可表为

$$|\Psi(t)\rangle=\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t\hat{H}(t')\mathrm{d}t'\right\}\cdot|\psi_1(0)\rangle.\tag{22}$$

可见在足够缓慢演变中,无任何十分微弱的量子跃迁.

3.2 实例Ⅱ在旋转周期变化磁场中的运动电子

$$\hat{H}(t)=\mu_e\cdot B\cdot\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\\ \sin\theta\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} & -\cos\theta\end{bmatrix},\tag{23}$$

其中 B,ω,θ 均为常数 $\mu_e=\dfrac{e\hbar}{2m_ec}$,而瞬时能量本征值和相应的本征态为

---

* 在以下的分析与计算中,我们一般不对时间 t 作参数化($t\to\boldsymbol{R}(t)$)表述处理,这样便于在叙述上更简明,同时也不会给计算结果带来丝毫影响

$$E_1(t) = -\mu_e B,\ |\psi_1(t)\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\begin{bmatrix} \dfrac{\sin\theta}{\sqrt{1+\cos\theta}} e^{i\phi_1(t)} \\ -\sqrt{1+\cos\theta}\cdot e^{i[\phi_1(t)+\omega t]} \end{bmatrix},$$

$$E_2(t) = \mu_e B,\ |\psi_2(t)\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\begin{bmatrix} \dfrac{\sin\theta}{\sqrt{1-\cos\theta}} e^{i\phi_2(t)} \\ \sqrt{1-\cos\theta}\cdot e^{i[\phi_2(t)+\omega t]} \end{bmatrix}.$$

作为范例,研究严格演变态$|\Psi(t)\rangle$(条件同上). 可以确定:

$$F_{21}(t) = \langle\psi_2(t)\left|\frac{d}{dt}\right|\psi_1(t)\rangle = -\frac{i}{2}\omega\cdot\sin\theta\cdot e^{i[\phi_1(t)-\phi_2(t)]} \neq 0, (0\leqslant t\leqslant T)$$

因而存在 Berry 几何相 $\gamma_1(C)$. 利用 Berry 公式(3)可以计算出

$$\gamma_1(C) = i\int_0^T \langle\psi_1(t)\left|\frac{d}{dt}\right|\psi_1(t)\rangle\cdot dt = -(1+\cos\theta)\pi, (0<\theta<\pi)$$

4　一个计算实例

通过量子跃迁趋于零过程的计算,将严格获得 Berry 几何相.

对上述实例Ⅱ通过这种严格计算给予验证:

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

其中 $\hat{H}(t)$由(23)式表示出,$|\Psi(t)\rangle|_{t=0} = |\psi_1(0)\rangle$. 而有关计算结果为

$$|\Psi(t)\rangle = A_{k_+}|\psi_{k_+}(t)\rangle + A_{k_-}|\psi_{k_-}(t)\rangle, (0\leqslant t\leqslant T) \tag{28a}$$

其中

$$|\psi_{k_\pm}(t)\rangle = e^{ik_\pm t}\begin{bmatrix}\alpha_{k_\pm} \\ \beta_{k_\pm}\cdot e^{i\omega t}\end{bmatrix}, \tag{28b}$$

$$k_\pm = \frac{1}{2}\{-\omega \pm\sqrt{\omega^2 - 4\bar{B}\omega\cos\theta + 4\bar{B}^2}\},$$
$$\beta_{k_\pm} = -\frac{k_\pm + \bar{B}\cdot\cos\theta}{\bar{B}\cdot\sin\theta}\alpha_{k_\pm};\ \alpha_{k_\pm} = \frac{\bar{B}\cdot\sin\theta}{\sqrt{k_\pm^2 + 2k_\pm\cdot\bar{B}\cdot\cos\theta + \bar{B}^2}}, \bar{B} = \frac{\mu_e B}{\hbar} \tag{28c}$$

$$A_{k_+} = \frac{e^{i\phi_1(0)}}{\sqrt{2}}\frac{(\bar{B}-k_-)\sqrt{1-\cos\theta}\sqrt{k_+^2 + 2k_+\cdot\bar{B}\cdot\cos\theta + \bar{B}^2}}{\bar{B}\cdot\sin\theta\cdot\sqrt{\omega^2 - 4\bar{B}\omega\cos\theta + 4\bar{B}^2}},$$
$$A_{k_-} = -\frac{e^{i\phi_1(0)}}{\sqrt{2}}\frac{(\bar{B}-k_+)\sqrt{1-\cos\theta}\sqrt{k_-^2 + 2k_-\cdot\bar{B}\cdot\cos\theta + \bar{B}^2}}{\bar{B}\cdot\sin\theta\cdot\sqrt{\omega^2 - 4\bar{B}\omega\cos\theta + 4\bar{B}^2}} \tag{28d}$$

由(28a)—(28d)得出的严格演变态$|\Psi(t)\rangle$,虽然满足了初始条件$|\Psi(0)\rangle = |\psi_1(0)\rangle$;但是,因存在不可避免的量子跃迁,以致于原来可严格满足的 cyclic 条件[1],在此已变为不可能了[9]. 为仍然在满足 cyclic 条件下严格计算出 Berry 几何相 $\gamma_1(C)$,必须对终态$|\Psi(T)\rangle$加以限制——使其有条件地满足 cyclic 条件:$|\Psi(T)\rangle = e^{i\alpha(T)}\cdot|\Psi(0)\rangle$,通过繁杂的计算(略)后,又可以获得此限制条件为

$$(a_1\cdot A_{k_+} + a_2\cdot A_{k_-})^2 + 2a_1\cdot a_2\cdot A_{k_+}\cdot A_{k_-}\{\cos[(k_+ - k_-)\cdot T] - 1\} = 1, \tag{29a}$$

其中

$$a_1 = \langle \psi_1(0) \mid \psi_{k_+}(0) \rangle = \frac{e^{-i\phi_1(0)}}{\sqrt{2}} \frac{(\bar{B} + k_+)\sqrt{1+\cos\theta}}{\sqrt{k_+^2 + 2k_+ \cdot \bar{B} \cdot \cos\theta + \bar{B}^2}},$$

$$a_2 = \langle \psi_1(0) \mid \psi_{k_-}(0) \rangle = \frac{e^{-i\phi_1(0)}}{\sqrt{2}} \frac{(\bar{B} + k_-)\sqrt{1+\cos\theta}}{\sqrt{k_-^2 + 2k_- \cdot \bar{B} \cdot \cos\theta + \bar{B}^2}}. \tag{29b}$$

因$(a_1 \cdot A_{k_+} + a_2 \cdot A_{k_-}) = 1$,故$\cos[(k_+ - k_-) \cdot T] = 1$,并由此可求得

$$\omega \Rightarrow \omega_n = \frac{2\bar{B}}{n^2 - 1}\left\{-\cos\theta + \sqrt{n^2 - \sin^2\theta}\right\}, \left(n = 2,3,\cdots, \bar{B} = \frac{\mu_e B}{\hbar}\right), \tag{30}$$

(30)式表明,只有当 ω 取 $\omega_n \xrightarrow[(n \to +\infty)]{(跳跃)} 0$ 时,才存在有条件地满足 cyclic 条件[9]时,作极限演变的演变态$|\Psi(t)\rangle$,$(0 \leqslant t \leqslant T)$,而伴随其极限演变,Berry 几何相 $\gamma_1(C)$将从总位相 $\alpha(T)$中扣除动力学位相后获得:

$$\gamma_1(C) = \lim_{\substack{\omega_n \to 0 \\ 即 n \to +\infty}} \Gamma_1(T), \tag{31}$$

其中 $\Gamma_1(T) = \alpha(T) - \left(-\frac{1}{\hbar}\int_0^T E_1(t) \cdot \mathrm{d}t\right)$.

对(31)式作严格计算验证:

$$\lim_{\substack{\omega_n \to 0 \\ 即 n \to +\infty}} \Gamma_1(T) = \lim_{\substack{\omega_n \to 0 \\ 即 n \to +\infty}} \left[\mathrm{tg}^{-1}\left\{\frac{a_1 \cdot A_{k_+} \cdot \sin(k_+ \cdot T) + a_2 \cdot A_{k_-} \cdot \sin(k_- \cdot T)}{a_1 \cdot A_{k_+} \cdot \cos(k_+ \cdot T) + a_2 \cdot A_{k_-} \cdot \cos(k_- \cdot T)}\right\} - \frac{\mu_e B}{\hbar} \cdot T\right] = \lim_{\substack{\omega_n \to 0 \\ 即 n \to +\infty}} \left[(n-1)\pi - \frac{2\mu_e B}{\hbar \cdot \omega_n} \cdot \pi\right]. \tag{32}$$

(32)式为$\infty - \infty$不定式,可以化为$\frac{0}{0}$不定式:

$$\lim_{\substack{\omega_n \to 0 \\ 即 n \to +\infty}} \Gamma_1(T) = \pi \cdot \lim_{\substack{n \to +\infty \\ 即 \left(\frac{1}{n}\right) \to 0}} \left\{\frac{\left[1 - \left(\frac{1}{n}\right)\right] \cdot \left[\sqrt{1 - \left(\frac{1}{n}\right)^2 \cdot \sin^2\theta} - \left(\frac{1}{n}\right) \cdot \cos\theta\right] + \left(\frac{1}{n}\right)^2 - 1}{\left(\frac{1}{n}\right) \cdot \left[\sqrt{1 - \left(\frac{1}{n}\right)^2 \cdot \sin^2\theta} - \left(\frac{1}{n}\right) \cdot \cos\theta\right]}\right\} \tag{33}$$

算出(33)式为 $-(1+\cos\theta) \cdot \pi$,正好为 Berry 几何相 $\gamma_1(C)$(参见(26)式).

本节计算表明,在前面实例Ⅱ中出现的 Berry 几何相是绝热极限导致的结果,或者说,是量子跃迁→0 所导致的结果. 可以从理论上严格证明(略),这一结论在一般意义下也是成立的.

5 总结

量子跃迁的存在与否将导致 Berry 几何相是否存在,而量子跃迁→0 将导致 Berry 几何相是由 non-adiabatic 到 adiabatic-limit 演变后严格获得[10],倪光炯等所作的有关工作[11]也证实了这点. 其实,Berry 在 1984 年的工作中,涉及到此量子跃迁问题便有所体

现,这可以从 Berry 对自旋 1/2 粒子在磁场中运动时所作的有关计算看出——演变过程中已包含了量子跃迁[1],而 Berry 开始明确地关注量子跃迁问题,则体现在 1987 年的工作中[12]. 在文献[12]里,Berry 已注意到量子跃迁即 non-adiabatic 引起的物理效应,这种物理效应很小以致于趋于零时,便导致严格产生出 Berry 几何相. 而 Berry 在 1990 年的工作中,已将演变波函数 $|\psi(t)\rangle$ 明确地改成近似等于,而不再等于[1]同一能级上的演变态 $\left|\psi(t)\right\rangle \approx \exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}tH(\delta t)\right\}\cdot\left|u_+(\delta t)\right\rangle$[13]. 这一看似细微的改变,已说明 Berry 也注意到无量子跃迁便不存在 Berry 几何相.

参考文献(References)

1 Berry M V. Proc. Rog. Soc. Lond. ,1984,**A392**:45—57

2 Suter D,Mueller K T,Pines A. Phys. Rev. Lett. ,1988,**60**(13):1218—1220;Tycko R. Phys. Rev. Lett. ,1987,**58**(22):2281—2284;Bitter T. Dubbers D. Phys. Rev. Lett. ,1987,**59**(3):251—254;Richardson D J,Kilvington A I et al. Phys. Rev. Lett. ,1988,**61**(18):2030—2033

3 Zygelman B. Phys. Rev. Lett. ,1990,**64**(3):256—259;Mead C A. Phys. Rev. Lett. ,1987,**59**(2):161—164;Moody J, Shapere A,Wilczek F. Phys. Rev. Lett. ,1986,**56**(9):893—896;Delacrétaz G,Grant E R et al. Phys. Rev. Lett. ,1986, **56**(24):2598—2601

4 Chiao R Y,WU Y S. Phys. Rev. Lett. ,1986,**57**(8):933—936;Tomita A,Chiao R Y. Phys. Rev. Lett. ,1986,**57**(8): 937—940;Simon R,Kimble H J,Sudarshan E C G. Phys. Rev. Lett. ,1988,**61**(1):19—22;Breuer H P,Dietz K, Holthaus M. Phys. Rev. 1993,**A47**(1):725—728

5 Zak J. Phys. Rev. 1989,**B40**(5):3156—3161;Bird D M,Preston A R. Phys. Rev. Lett. ,1988,**61**(25):2863—2866

6 LI H Z. Phys. Rev. Lett. ,1987,**58**(6):539—542;Isler K,Paranjape M B. Phys. Rev. ,1990,**D41**(2):561—563;Nikam R S,Ring P. Phys. Rev. Lett. ,1987,**58**(10):980—983;Nikam R S,Ring P et al. Phys. Lett. 1990,**B35**(3,4):215—220;Liang J Q. Phys. Lett. ,1989,**A142**(1):11—13

7 ZHANG ZhongCan,FANG ZhengYun,HU ChenGuo et al. HEP&NP(in Chinese),1999,**23**(10):980—991
(张忠灿,方祯云,胡陈果等. 高能物理与核物理,1999,**23**(10):980—991)

8 ZHANG ZhongCan,FANG ZhengYun,HU ChenGuo et al. Journal of Chongqing University(in Chinese),1999,**22**(5): 104—111
(张忠灿,方祯云,胡陈果等. 重庆大学学报,1999,**22**(5):104—111)

9 NI G J,SUN P,KONG D. Journal of FuDan University(in Chinese),1999,**38**(3):257—260
(NI G J,SUN P,KONG D. 复旦学报,1999,**38**(3):257—260)

10 Aharonov Y,Anandan J. Phys. Rev. Lett. ,1987,**58**(16):1593—1596

11 NI G J,CHEN S Q,SHEN Y L. Phys. Lett. ,1995,**A197**:100—106

12 Berry M V. Proc. Rog. Soc. Lond. ,1987,**A414**:31—46

13 Berry M V. Proc. Rog. Soc. Lond. ,1990,**A430**:405—411

Berry Geometric Phase and Quantum Transition*

ZHANG ZhongCan FANG ZhenYun HU ChenGuo SUN ShiJun
(*Physics Department of Science College, ChongQing University, ChongQing* 400044, *China*)

Abstract For the emergence of Berry geometric phase, we analyze the relevant physical background condition of the weak transitions among quantum energy-levels. We elaborate a further discussion on the internal relationship between the strict obtainment of Berry geometric phase and the weak transitions. Our study shows that the strict obtainment of Berry geometric phase is the natural result of the adiabatic limit effect of weak transitions among quantum energy-levels. These transitions occur inevitably during the evolution process of quantum system.

Key words Berry geometric phase, quantum transition, adiabatic approximation, adiabatic limit

---

Received 8 October 1999, Revised 7 March 2000

* Supported by National Natural Science Foundation of China(19835040)