

高等量子力学（第二章）

孙昌璞

中物院研究生院/北京计算科学研究中心

Beijing Computational Science Research Center (CSRC)



第2章：量子系统的时间演化

- 2.1 从运动方程到态叠加原理
- 2.2 从海森堡运动方程到牛顿方程
- 2.3 海森堡表象与量子力学的统一描述
- 2.4 二能级系统与受迫谐振子
- 2.5 量子体系演化：Dyson展开与微扰论
- 2.6 量子绝热近似方法和几何相位
- 2.7 量子力学的费曼路径积分表述

2.1 运动方程与态叠加原理

假设初始时刻的态矢与 t 时刻相差一个时间相关的么正变换——时间演化算子，使时间演化满足线性叠加原理

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle$$

$$U(\alpha|\Psi_1\rangle + \beta|\Psi_2\rangle) = \alpha U|\Psi_1\rangle + \beta U|\Psi_2\rangle$$

那么对任意初态

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= U(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle \\ &= U(t, t')|\Psi(t')\rangle \\ &= U(t, t')U(t', t_0)|\Psi(t_0)\rangle \end{aligned}$$

即演化算子（矩阵）有“半群”关系

$$U(t, t_0) = U(t, t')U(t', t_0)$$

从时间演化算子到运动方程

取 $t_0 = 0$, 演化有以下特性

$$U(t) \equiv U(t, 0)$$

$$U^\dagger U = I = U U^\dagger$$

$$U(0) = I$$

$$U(-t) \equiv U^\dagger(t)$$

考虑时间很小时的演化

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{|\Psi(t)\rangle - |\Psi(0)\rangle}{t} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t) - I}{t} |\Psi(0)\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle = H(t) U(t) |\Psi(0)\rangle$$

从时间演化算子到运动方程

定义哈密顿量 $H(t)$:

$$\begin{aligned}\frac{H(t)U(t)}{i\hbar} &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t) - I}{t} \\ H(t) &= i\hbar U^+(t) \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t) - I}{t}\end{aligned}$$

从而有

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = H U(t) \quad U(0) = I$$

根据狄拉克的讨论，如果波函数的时间演化是线性的，就自动地可以推出薛定谔方程。

从演化算子到薛定谔方程

一般态矢 $|\Psi(t)\rangle$ 定义为

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle$$

它满足薛定谔方程和对易关系

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

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$[x, p] = i\hbar$$

从时间演化算子到海森堡运动方程

定义海森堡表象的力学量

$$A(t) = U^\dagger(t)AU(t)$$

可以证明它们满足海森堡运动方程

证明

$$i\hbar \frac{d}{dt} A(t) = [A(t), H(t)]$$

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^\dagger(t) &= U^\dagger(t)H \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) &= HU(t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} A(t) &= i\hbar \dot{U}^\dagger(t)AU(t) + i\hbar U^\dagger(t)A\dot{U}(t) \\ &= -U^\dagger(t)H(UU^\dagger)AU(t) + U^\dagger(t)A(UU^\dagger)HU(t) \\ &= [A(t), H(t)] \end{aligned}$$

海森堡哈密顿量的经典对应（狄拉克）

基本力学量的海森堡方程

经典力学的正则方程

$$x(t) = U^\dagger(t)xU(t), p(t) = U^\dagger(t)pU(t)$$

$$\dot{A} = \{A, H\}$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} x(t) &= [x(t), H(t)] \\ i\hbar \frac{d}{dt} p(t) &= [p(t), H(t)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} x(t) &= \{x, H\} \\ \frac{d}{dt} p(t) &= \{p, H\} \end{aligned}$$

对易关系

$$[A, B] = AB - BA$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$\{A, B\} = \frac{\partial A \partial B}{\partial x \partial p} - \frac{\partial A \partial B}{\partial p \partial x}$$

$$\frac{d}{dt} x(t) = p, \frac{d}{dt} p(t) = -\frac{d}{dx} V(x)$$

狄拉克正则量子化

$$F(P, X) = \sum_{nm} C_{nm} P^n X^m$$

$$[X, P] = 0$$

量子化



$$F(p, x) = \sum_{nm} C_{nm} p^n x^m$$

$$[x, p] = i\hbar$$

$$\{, \} \Rightarrow \frac{[,]}{i\hbar}$$

量子化



$$\dot{A} = \{A, H\}$$

$$\dot{A} = \frac{1}{i\hbar} [A, H]$$

薛定谔方程与态叠加原理

坐标表象波函数 $\Psi(x, t) = \langle x | \Psi(t) \rangle$ 满足薛定谔方程

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) &= H \Psi(x, t) \\ H &= \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \end{aligned}$$

一般态矢 $|\Psi(t)\rangle$ 满足抽象的薛定谔方程和对易关系

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle \quad [x, p] = i\hbar$$

运动方程与态叠加原理

薛定谔方程的线性叠加也满足相同的薛定谔方程

$$|\Psi(t)\rangle = \alpha|\Psi_1(t)\rangle + \beta|\Psi_2(t)\rangle$$

$$|\Psi(0)\rangle = \alpha|\Psi_1(0)\rangle + \beta|\Psi_2(0)\rangle$$

其初态是原来初态的线性叠加

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\alpha|\Psi_1(t)\rangle] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\beta|\Psi_2(t)\rangle] \\ &= \alpha \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_1(t)\rangle \right] + \beta \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_2(t)\rangle \right] \\ &= \alpha H|\Psi_1(t)\rangle + \beta H|\Psi_2(t)\rangle \\ &= H[\alpha|\Psi_1(t)\rangle + \beta|\Psi_2(t)\rangle] \\ &= H|\Psi(t)\rangle \end{aligned}$$

其中叠加系数不含时间, H 和 $\frac{\partial}{\partial t}$ 是线性算子

时变系统的海森堡表象

在薛定谔表象中，哈密顿量含时： $H = H_S(t)$

定义两种基矢

薛定谔基矢 (S-)基矢： $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |m\rangle, \dots\}$

海森堡基矢 (H-)基矢： $\{|1(t)\rangle, |2(t)\rangle, \dots, |m(t)\rangle, \dots\};$

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |m(t)\rangle = H_S(t) |m(t)\rangle; \\ |m(0)\rangle = |m\rangle; \end{cases}$$

1、证明：若， $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$ ，

则 $\langle m(t)|n(t)\rangle = \delta_{mn}$

时变系统的海森堡表象

证明

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |m(t)\rangle = H_S(t) |m(t)\rangle \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle m(t)| = \langle m(t)| H_S(t) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \langle m(t) | n(t) \rangle = \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle m(t) | \right) | n(t) \rangle + \langle m(t) | \left(\frac{\partial}{\partial t} | n(t) \rangle \right)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} (-\langle m(t) | H_S(t) | n(t) \rangle + \langle m(t) | H_S(t) | n(t) \rangle) = 0$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle m(t) | n(t) \rangle &= \langle m(0) | n(0) \rangle \\ &= \delta_{mn} \end{aligned}$$

时变系统的海森堡表象的波函数

T 时刻波函数 $|\psi(t)\rangle$ 也满足薛定谔方程

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H_S(t) |\psi(t)\rangle \\ |\psi(t=0)\rangle = |\psi(0)\rangle \end{cases}$$

在H-基矢下展开, $|\psi(t)\rangle = \sum C_n(t) |n(t)\rangle$, 同理可证

$$C_n(t) = \langle n(t) | \psi(t) \rangle = \langle n(0) | \psi(0) \rangle = C_n(0)$$

波函数在H-基矢下的展开系数与初态在S-基矢下的展开系数相同

时变系统的海森堡表象：时变力学量

两种表象下的时变力学量矩阵元定义为

$$A_{mn}(t) = \langle m | A_H(t) | n \rangle = \langle m(t) | A_S(t) | n(t) \rangle$$

满足矩阵形式的运动方程

$$i\hbar \dot{A}_H(t) = [A_H(t), H(t)] + i\hbar \left(\frac{\partial A_S(t)}{\partial t} \right)_H$$

时变系统的海森堡表象

证明

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle m(t) | A_S | n(t) \rangle &= \langle m | A_S H_S - H_S A_S | n \rangle + i\hbar \langle m | \frac{\partial A_S}{\partial t} | n \rangle \\ &= i\hbar \langle m | \frac{\partial A_S}{\partial t} | n \rangle + \sum_l \{ \langle m | A_S | l \rangle \langle l | H_S | n \rangle - \langle m | H_S | l \rangle \langle l | A_S | n \rangle \} \end{aligned}$$

上式的矩阵形式即为

$$i\hbar \dot{A}_H(t) = [A_H(t), H(t)] + i\hbar \left(\frac{\partial A_S(t)}{\partial t} \right)_H$$

谐振子系统的海森堡运动方程

谐振子的哈密顿量为

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right)$$

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right), a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right)$$

$$[a, a^+] = 1$$

海森堡表象下

$$\dot{a} = \frac{1}{i\hbar} [a, H] = -i\omega a$$

谐振子系统的海森堡运动方程

$$a(t) = a(0)e^{-i\omega t}$$

$$a^+(t) = a^+(0)e^{i\omega t}$$

$$x(t) = x \cos \omega t + \frac{p}{m\omega} \sin \omega t$$

$$p(t) = p \cos \omega t - x m \omega \sin \omega t$$

$$[x(t_1), x(t_2)] = \frac{i\hbar}{m\omega} \sin[\omega(t_2 - t_1)]$$

$$\delta x = x(t_2) - x(t_1)$$

距离的测量具有不确定性

自由粒子的海森堡运动方程与标准量子极限

$$H = \frac{p^2}{2m} \longrightarrow \dot{p} = 0, \quad \dot{x} = \frac{p}{m}, \quad x(t) = x(0) + \frac{p(0)}{m} t$$

测量 t 时刻粒子的位置 $x(t)$, 均方根涨落为

$$\Delta x(t) = \sqrt{\Delta x^2(0) + \frac{\Delta p^2(0)t^2}{m^2}}$$

由不确定关系 $\Delta x(0)\Delta p(0) \geq \hbar/2$, $\Delta p(0) \geq \frac{\hbar}{2\Delta x(0)}$:

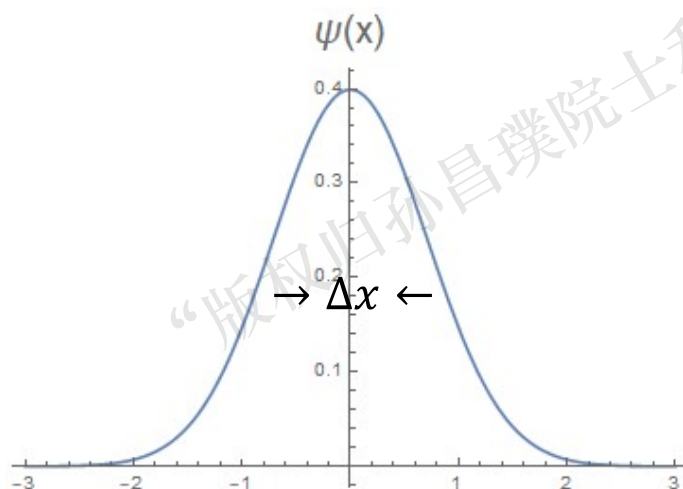
$$\Delta x(t) \geq \sqrt{\Delta x^2(0) + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \Delta x^2(0)}} \geq \sqrt{2 \sqrt{\frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}}} = \sqrt{\frac{\hbar t}{m}}$$

当且仅当 $\Delta x(0) = \sqrt{\frac{\hbar t}{2m}}$, 上式取等号。

$$\begin{aligned} x^2 + \frac{a^2}{x^2} &= \left(x - \frac{a}{x}\right)^2 + 2a \\ &\geq 2a \end{aligned}$$

波包扩散与位置测量

不确定关系原则上不限制 Δx 的测量精度，
位置时间演化的测量精度源于波包扩散！



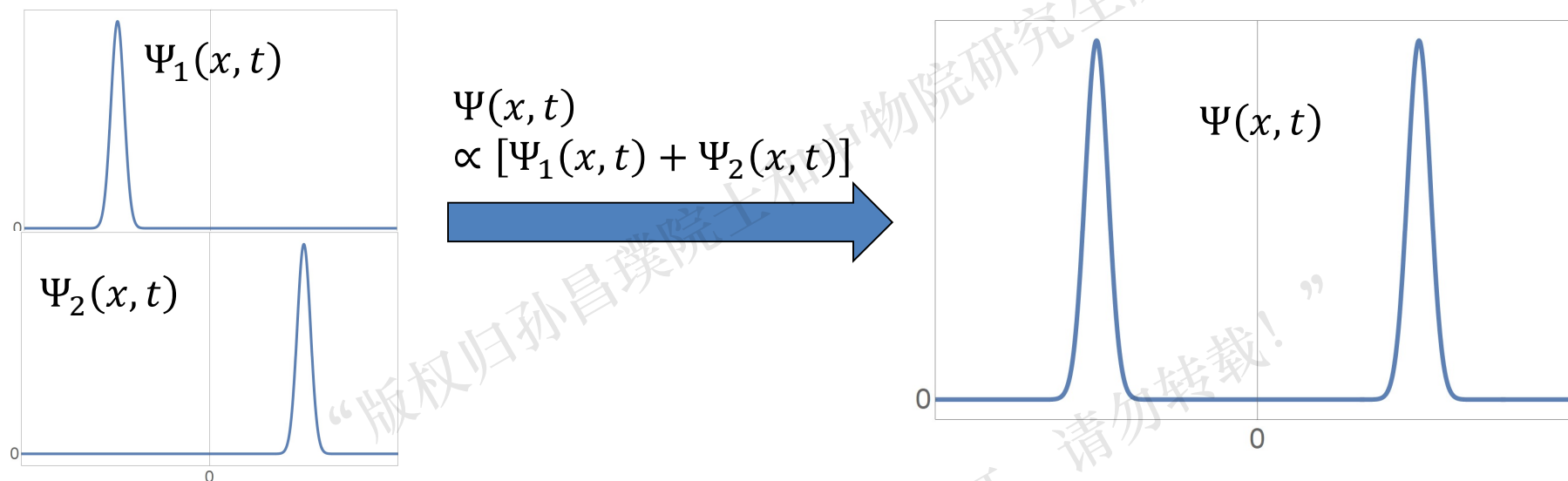
$$t \rightarrow \infty \text{ 时, } \Delta x \rightarrow \infty$$

爱因斯坦： 由于扩散，不能用波包描述宏观粒子的自由运动

玻恩： 扩散速度与 $\sqrt{m}$ 成反比，可观测时间内没有问题

波包扩散与位置测量

1954年，爱因斯坦提出给玻恩观点的一个反驳：



无论满足薛定谔方程的波包 $\Psi_1(x, t)$ 和 $\Psi_2(x, t)$ 多么窄，其叠加态 $\Psi(x, t)$ 并非窄波包，且依然满足薛定谔方程。

这个问题直到1980年代才得到解决：Zeh和Joos发现，由于环境的影响，上述 $\Psi_1(x, t)$ 和 $\Psi_2(x, t)$ 的叠加态并不能长时间存在，与环境的耦合引起了波包的定域化（孙昌璞，于理华，1993–1995年）。

距离和动量测量的标准量子极限

距离测量

$$\Delta x(t) \geq \sqrt{\frac{\hbar t}{m}}$$

动量测量

$$p = m \lim_{t \rightarrow 0} \frac{x(t) - x(0)}{t}$$

$$\Delta p = \frac{m}{t} \sqrt{(\Delta x_1)^2 + (\Delta x_2)^2 + (\Delta x_{add})^2}$$

Δx_{add} 是对 $x(0)$ 点测量时动量扰动引起的误差传递

$$\Delta x_{add} = \frac{\Delta p_{add} t}{m} = \frac{\Delta p(0) t}{m}$$

$$\Delta p \geq \sqrt{\frac{2\hbar m}{t}}$$

2.2 从海森堡运动方程到牛顿方程

先证明： x 上的函数 $F(x)$ ，与动量的对易子正比于 $F(x)$ 微分

$$[p, F(x)] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} F(x)$$

证明

取 $\hbar = 1$ 将上式左边作用于任意波函数

$$\begin{aligned}(pF(x) - F(x)p)\Psi(x) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (F(x)\Psi(x)) + F(x)i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \\ &= -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} F(x) \right) \Psi(x)\end{aligned}$$

从海森堡运动方程到牛顿方程

对于位势 $V(x)$ 中的粒子

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

动量算子的时间变化

$$\dot{p} = \frac{1}{i\hbar} [p, H] = -\frac{\partial}{\partial x} V(x)$$

有类似于牛顿方程的爱伦斯特方程（爱氏方程）

$$\dot{x} = \frac{1}{i\hbar} [x, H] = \frac{p}{m} \qquad m\ddot{x} = -\frac{\partial}{\partial x} V(x)$$

牛顿方程的出现

爱氏方程何时可以变为牛顿方程?

$$m\ddot{X}_0 = F = -\partial_{x_0} V(x_0)$$

x_0 = 粒子的质心坐标

$$\Psi(x) = \left(\frac{1}{2\pi a^2}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2} + i\Phi\right], (a > 0)$$

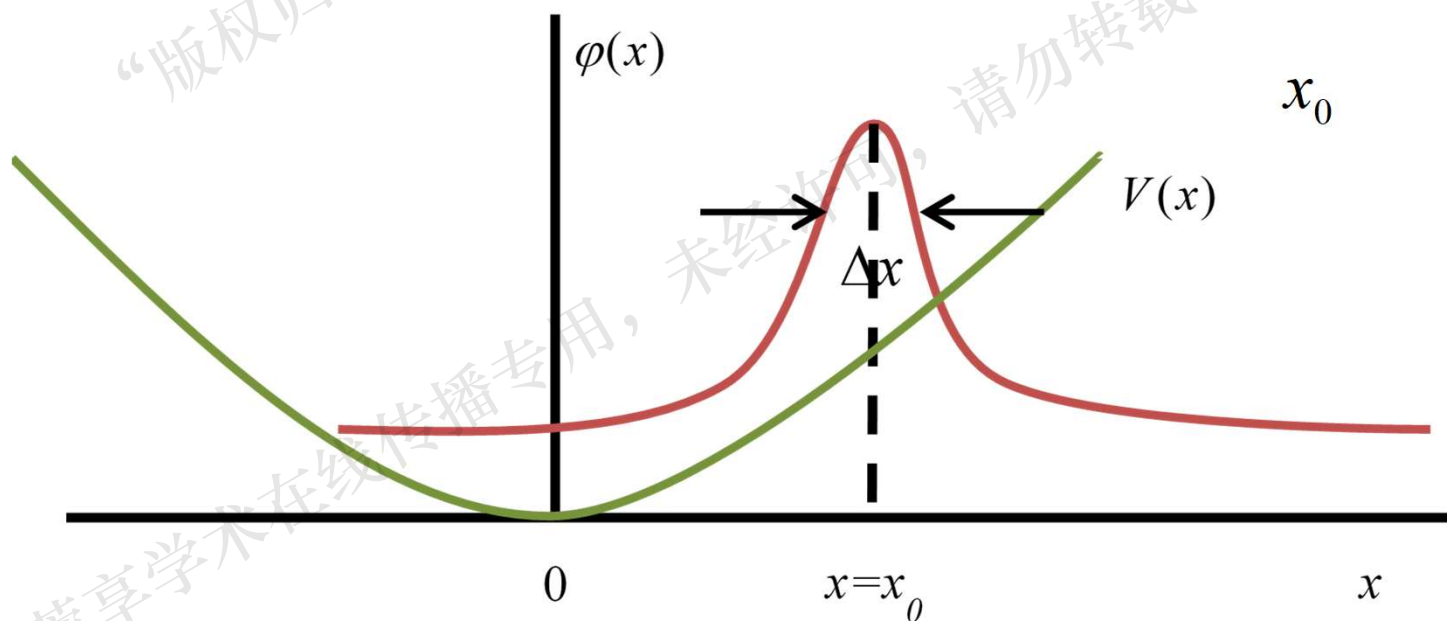
$$\bar{x} = \langle \Psi | x | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^2(x) x dx = x_0$$

$$\overline{x^2} = \langle \Psi | x^2 | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^2(x) x^2 dx = a^2 + x_0^2$$

牛顿方程的出现

波包的中心 x_0 是坐标平均值，波包的宽度是坐标的涨落的平方根

$$\Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - (\bar{x})^2} = a$$



牛顿方程的出现

$x_0 = \bar{x}$, 在其附近展开位势的导数

$$\partial_x V(x) = \partial_{\bar{x}} V(\bar{x}) + (x - \bar{x}) \partial_{\bar{x}^2}^2 V(\bar{x}) + \frac{1}{2} (x - \bar{x})^2 \partial_{\bar{x}^3}^3 V(\bar{x}) + \dots$$

$$m\ddot{X} = -\partial_{\bar{x}} V(\bar{x}) - \frac{1}{2} (\Delta x)^2 \partial_{\bar{x}^3}^3 V(\bar{x}) \quad (a \rightarrow 0, \Delta x \rightarrow 0)$$

量子力学效应由坐标的涨落决定

当波包宽度很小时.有质心的牛顿方程

$$m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial \bar{x}} V(\bar{x}) \equiv F(\bar{x})$$

牛顿方程的出现

结论：如果与波包的宽度相比, $V(x)$ 变化比较慢, 则波包中心运动与经典粒子质心运动相似。

例子: 谐振子势的三阶以上导数为零, 爱氏方程精确地变为牛顿方程, 其中心运动与经典谐振子运动完全一样

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad \ddot{X} = -\omega^2 \bar{x}$$

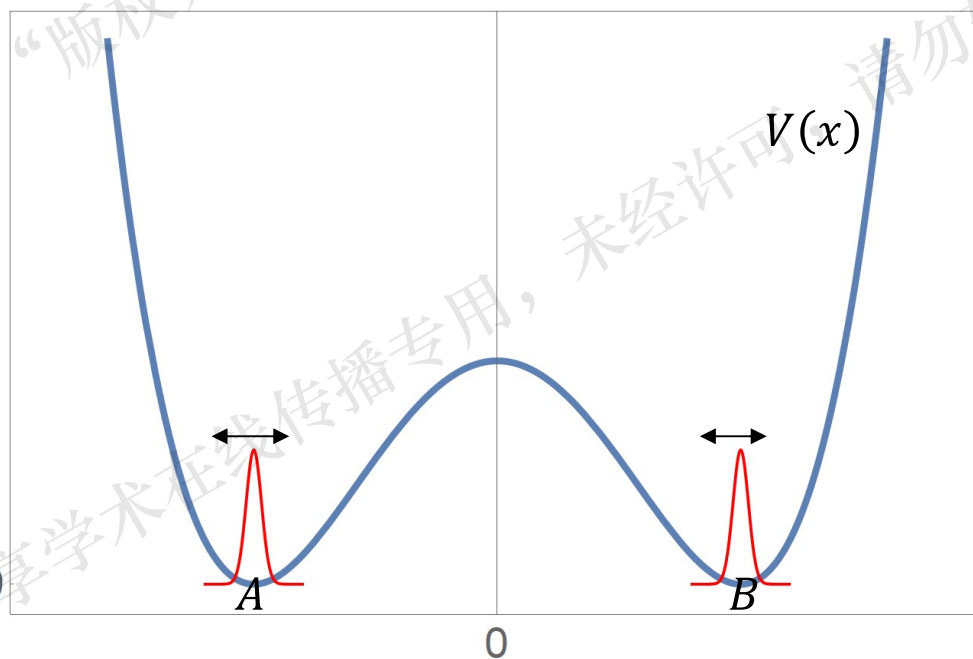
当波包正好是相干态, 可以证明波包的宽度不变, 即证明对于相干态:

$$\frac{d}{dt} (\Delta x)^2 = 0$$

研究性习题

研究双阱势 $V(x) = k(x^2 - a^2)^2$ 中粒子运动的量子涨落效应。

提示：利用“平均场”的方法把正比于 Δx^2 的项当作微扰，用数值解法研究稳定点附近的运动。



耗散谐振子的海森堡方程

耗散谐振子的经典运动方程即为海森堡方程

$$\ddot{x} = -\gamma\dot{x} - \omega^2x, \quad \gamma > 0$$

$$\frac{d}{dt}[x, \dot{x}] = -\gamma[x, \dot{x}] \quad [x, \dot{x}] = e^{-\gamma t} i\hbar$$

选正则动量

$$p = e^{\gamma t} \dot{x}$$

使得基本对易关系不依赖于时间

$$[x, p] = i\hbar$$

耗散谐振子的有效哈密顿量

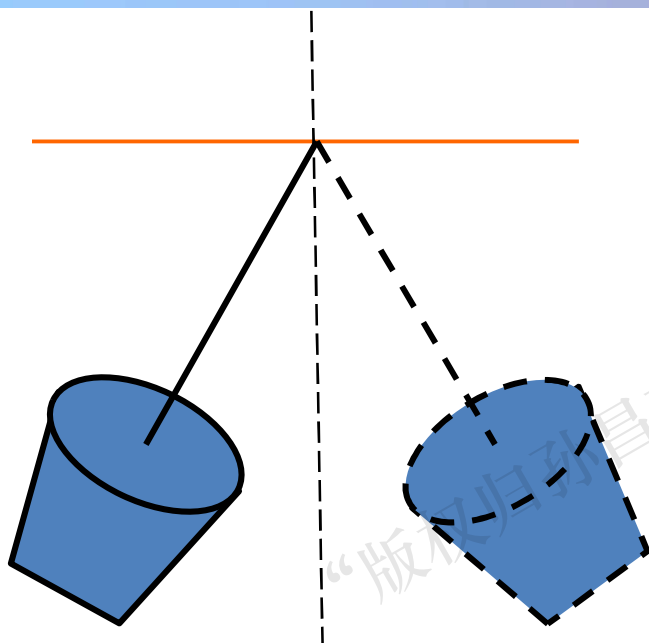
$$\begin{aligned}\dot{p} &= \frac{d}{dt}(\dot{x}e^{\gamma t}) = \ddot{x}e^{\gamma t} + \gamma\dot{x}e^{\gamma t} \\ &= (-\gamma\dot{x} - \omega^2 x)e^{\gamma t} + \gamma\dot{x}e^{\gamma t} = -\omega^2 x e^{\gamma t} \\ \dot{p} &= -\omega^2 x e^{\gamma t}, \dot{x} = e^{-\gamma t} p\end{aligned}$$

有效哈密顿量

$$H = \frac{p^2}{2m} e^{-\gamma t} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 e^{\gamma t}$$

可以验证：海森堡方程恰好给出耗散谐振子的运动方程

一般情况下耗散谐振子



一个置于雨中环境形成的变质量单摆，
自质量 e 指数增加从而停下来。

$$m(t) = m(0)e^{\gamma t}$$

任何位势中耗散系统的有效哈密顿量为

$$H = \frac{p^2}{2m} e^{-\gamma t} + V(x) e^{\gamma t}$$

$$\longrightarrow \ddot{x} = -\gamma \dot{x} - \frac{1}{m} \frac{\partial V}{\partial \bar{x}}$$

以上对耗散系统的描述并不完备，正确的描述必须考虑耗散-涨落定理，要有涨落-布朗运动力的作用

习题

研究在没有外场($V = 0$)时, 一个耗散系统 $H_{\text{eff}} = \frac{p^2}{2m} e^{-\frac{\gamma t}{m}}$ 中的高斯波包如何演化(扩散)。

提示: 求解薛定谔方程 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H_{\text{eff}}(t) \psi(t)$,

作时间的变量代换 $t \rightarrow t_\gamma = \frac{m}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t/m})$,

那么 $t \rightarrow \infty$ 时, $t_\gamma \rightarrow m/\gamma$, 波包定域化。

量子力学中的力：FH定理

通过Feynman-Hellmann(F-H)定理进一步理解

什么是量子力学中的力？什么是化学键？

F-H定理：体系的哈密顿量 $H = H(\lambda)$ 依赖于参数 λ

$$H(\lambda)|n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda)|n(\lambda)\rangle$$

$$\frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial \lambda} = \left\langle n(\lambda) \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| n(\lambda) \right\rangle$$

量子力学中的力：FH定理

证明：对上式微商

$$\begin{aligned}\text{左} &= \partial_\lambda (H(\lambda)|n(\lambda)\rangle) = (\partial_\lambda H)|n(\lambda)\rangle + H\partial_\lambda |n(\lambda)\rangle \\ &= \partial_\lambda E_n(\lambda)|n(\lambda)\rangle + E_n(\lambda)\partial_\lambda |n(\lambda)\rangle = \text{右}\end{aligned}$$

两边同乘 $\langle n(\lambda)|$

$$H(\lambda)|n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda)|n(\lambda)\rangle$$

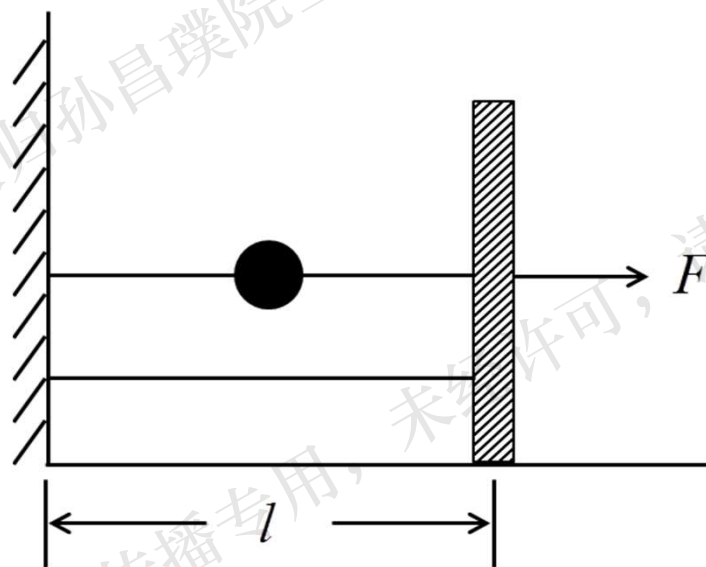
$$\langle n|\partial_\lambda H|n\rangle + E_n\langle n|\partial_\lambda |n\rangle = \partial_\lambda E_n + E_n\langle n|\partial_\lambda |n\rangle$$

F-H定理得证

量子力学中的力：无限深势阱

单分子气体模型：

一个粒子在一个刚性壁可以移动的一维无限深势阱中运动。



量子力学中的力：无限深势阱

把阱的宽度作为一个参数，则可以得到能量本征函数

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right) \triangleq \langle x|n\rangle$$

对应的本征值

$$E_{n,l} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ml^2}$$

当粒子处于 $\Psi_n(x)$ ，壁上受到排斥力为

$$\bar{F} = - \left\langle n \left| \frac{\partial V}{\partial l} \right| n \right\rangle = - \frac{\partial E_n}{\partial l} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{ml^3}$$

量子力学中的力：维里定理

思考与练习

证明对于

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(x)$$

所有的本征态 $|n\rangle$, 有(维里定理)

$$\left\langle n \left| \frac{p^2}{2m} \right| n \right\rangle = \frac{1}{2} \langle n | x \partial_x V(x) | n \rangle$$

例子

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$\left\langle n \left| \frac{p^2}{2m} \right| n \right\rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \langle n | x^2 | n \rangle$$

量子力学中的力：维里定理

在动量表象下, 把 $\hbar$ 当初参数

$$x = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, \frac{\partial x}{\partial \hbar} = i \frac{\partial}{\partial p} = \frac{x}{\hbar}$$

$$\frac{\partial H}{\partial \hbar} = \frac{\partial V(x)}{\partial \hbar} = \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \hbar} = \frac{x}{\hbar} \frac{\partial V}{\partial x}$$



$$\frac{\partial E_n}{\partial \hbar} = \frac{1}{\hbar} \left\langle n \left| x \frac{\partial V}{\partial x} \right| n \right\rangle$$



$$\left\langle n \left| \frac{p^2}{2m} \right| n \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle n \left| x \frac{\partial V}{\partial x} \right| n \right\rangle$$

量子力学中的力：维里定理

证明：在坐标表象下

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \hbar} = -\frac{\hbar}{m} \nabla^2 = \frac{p^2}{m\hbar}$$

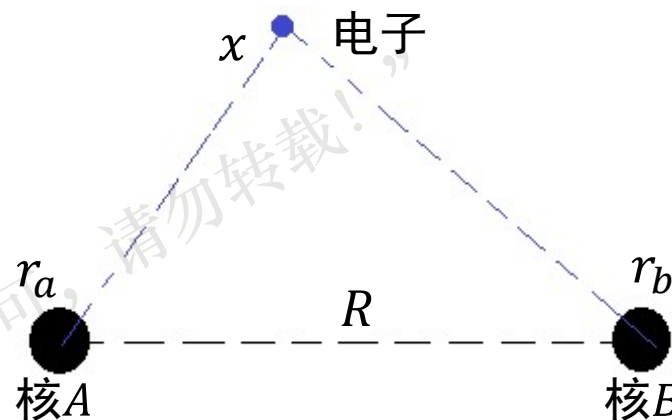


$$\frac{\partial E_n}{\partial \hbar} = \frac{2}{\hbar} \left\langle n \left| \frac{p^2}{2m} \right| n \right\rangle$$

量子力学中力的概念：化学键

考虑仅有一个电子的双原子分子。相比电子，原子核质量很大，假设它们相对静止。这时写下哈密顿量（ T_{AB} 是原子核动能），核坐标当成一个参数

$$H = T_{AB}(R) + V(R) + H_e + W(R, x)$$



T_{AB} 是原子核动能， $V(R)$ 是原子核间的排斥势，

H_e 是电子自身的哈密顿量， $W(R, x)$ 是电子-核的吸引相互作用

量子力学中力的概念：化学键

固定 R 求解本征方程

$$[H_e + V(R) + W(R, x)]\Phi_n(x, R) = E_n(R)\Phi_n(x, R)$$

其中把 R 当作F-H定理中的参数。假设原子核完全不动,

$$T_{AB} = 0$$

$$H_0 \approx H_e + V(R) + W(R, x)$$

以上将核坐标 R 完全视为参数

量子力学中力的概念：化学键

当电子处于第 n 个能级，能量平均值为

$$E_n(R) = \langle n | H_0 | n \rangle$$

根据F-H定理，原子核间的力

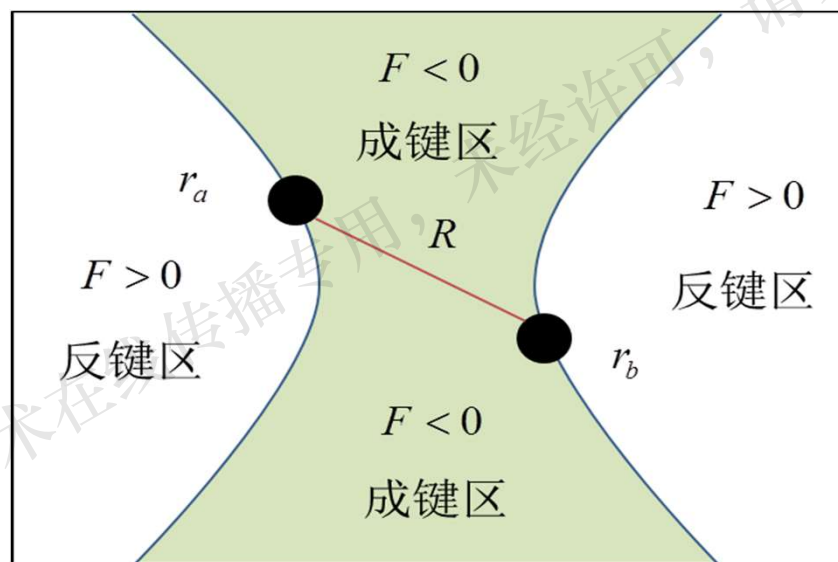
$$\begin{aligned} F &= - \frac{\partial E_n(R)}{\partial R} = - \left\langle n \left| \frac{\partial H_0}{\partial R} \right| n \right\rangle \\ &= - \left\langle n \left| \frac{\partial V(R, x)}{\partial R} \right| n \right\rangle \\ &\approx - \langle n | \partial_R V(R) | n \rangle - \left\langle n \left| \frac{\partial W(R, x)}{\partial R} \right| n \right\rangle \end{aligned}$$

在一定条件下，通常第一项为排斥力，而第二项则是吸引力，形成化学键。

量子力学中力的概念：化学键

有效力：
$$F = F(R) = F(r_a - r_b)$$

在特定的区域， F 为正的，称为反键区，在另外一些区域， F 为负的，代表吸引力，这样区域称为成键区。在这个区域中，电子产生的有效作用力把两个核束缚在一起，形成化学键。

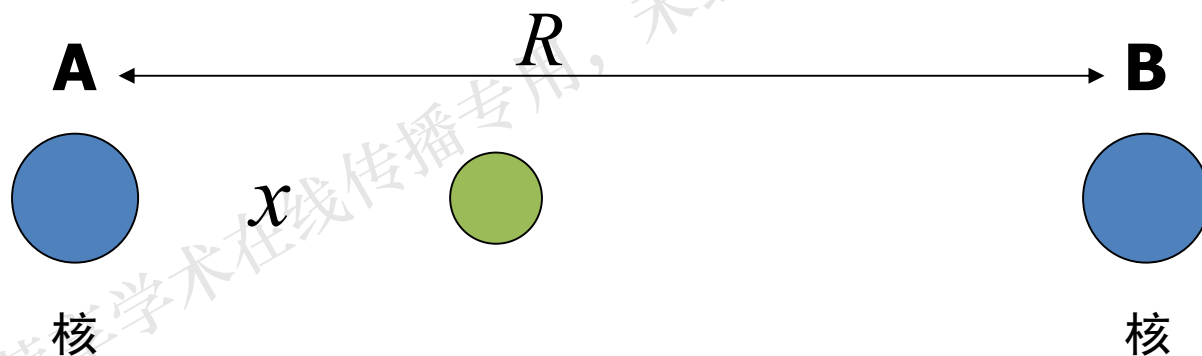


研究性习题

一维分子，在一维空间有两个原子核，它们均带正电荷，则它们不动时之间有排斥势， $V(R) = \frac{c}{R}$ ， c 是一个常数。原子核中间有一个带负电的电子，它与两个核之间具有吸引势

$$V_{\alpha}(x) = k_{\alpha}(R_{\alpha} - x)^2, \alpha = A, B$$

试分析由电子诱导出两个原子核之间的作用力。



量子力学中力的概念：化学键

研究此问题请注意 核不动电子运动的势函数为

$$V_T(x, R) = \frac{c}{R} + k_a x^2 + k_b (R - x)^2$$

$$F = - \left\langle n \left| \frac{\partial V_T}{\partial R} \right| n \right\rangle = \left\langle \frac{c}{R^2} - 2k_b (R - x) \right\rangle$$

$$= \left\langle \frac{c}{R^2} - k_b R \right\rangle + 2k_b \left\langle x - \frac{R}{2} \right\rangle$$

对称波函数 $\left\langle x - \frac{R}{2} \right\rangle = 0$

$$F = - \left\langle \frac{c}{R^2} - k_b R \right\rangle$$

$$R < \sqrt[3]{\frac{c}{k_b}}$$
$$F < 0$$

2.3 表象理论：矩阵力学与波动力学的统一

区分中文“表象”和“表示”，分别对应于英文Picture和Representation

两种方式描述量子力学

海森堡表象	薛定谔表象
波函数 $ \Psi_H\rangle = \Psi_S(0)\rangle$ 不随时间变	波函数 $ \Psi_S(t)\rangle$ 随时间变
算子 $A_H(t)$ 随时间变	算子 A_S 不随时间变
矩阵方程: $\dot{A}(t) = \frac{1}{i\hbar} [A(t), H(t)]$	波动方程: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t)\rangle = H \Psi(t)\rangle$
初值条件: $A_H(0) = A_S$	初值条件: $ \Psi_S(0)\rangle = \Psi_H\rangle$
等价性: $ \Psi(t)\rangle = U \Psi(0)\rangle$ $A(t) = U^\dagger(t) A U(t)$ $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = H U(t)$	

波恩几率诠释决定了两种表象是等价的

薛定谔表象下，量子体系在 $t = 0$ 时处于以下状态

$$|\Psi(0)\rangle = \sum C_n |n\rangle \quad A|n\rangle = a_n |n\rangle$$

t 时刻波函数为

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle = \sum C_n U(t)|n\rangle = \sum_m \sum_n C_n \langle m|U(t)|n\rangle |m\rangle$$

此时测得 A 的本征值为 a_m 的几率为

$$P_m^S = \left| \sum_n C_n \langle m|U(t)|n\rangle \right|^2 = |\langle m|U(t)|\Psi(0)\rangle|^2$$

A 的平均值为

$$\overline{A_s} = \sum P_m^S a_m = \langle \Psi(0) | U^\dagger(t) A U(t) | \Psi(0) \rangle$$

波恩几率诠释决定了两种表象是等价的

在海森堡表象下测量

$A(t)$ 的本征函数

$$A(t) = U^\dagger(t) A U(t)$$

$$|m(t)\rangle = U(t)|m\rangle$$

$$A_H = \langle \Psi(0) | A(t) | \Psi(0) \rangle = \overline{A_S}$$

在

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_m \langle m(t) | \Psi(0) \rangle |m(t)\rangle$$

测得 a_m 的几率为

$$P_m^H = |\langle m(t) | \Psi(0) \rangle|^2 = |\langle m | U(t) | \Psi(0) \rangle|^2 = P_m^S$$

波恩几率诠释决定了两种表象是等价的

以上分析表明，基于量子力学的标准诠释—波恩解释，在两种表象进行力学量的测量。不仅得到期望值是一样的而且测得每一个随机结果，事件发生的概率也是一样，从这个意义上讲，矩阵力学和波动力学对微观世界的描述是等价的。

历史上，薛定谔和Ekart曾经在波恩几率诠释提出前证明了两种表示的等价，且并未声称使用了几率诠释。怎么理解这件事情是一个未解之谜，也与玻尔对玻恩几率诠释重要性的评价有关。

“相互作用”表象

以上讨论只是针对哈密顿不显含时间，但实际问题中系统参数可能随时间变化，哈密顿量

$$H = H_0 + V(t)$$

则可分为不含时间部分 H_0 和“相互作用”部分 $V(t)$

定义相互作用表象

$$|\Psi(t)\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar} |\Psi(t)\rangle$$

$$A_I = e^{iH_0 t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar}$$

其中 $|\Psi(t)\rangle$ 满足 H 支配的薛定谔方程， A 是薛定谔表象中的力学量。

“相互作用”表象

现在我们证明

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle_I = V_I |\Psi(t)\rangle_I \quad (1)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_I(t) = [A_I(t), H_0] \quad (2)$$

$$\text{其中 } V_I = U_0^\dagger V U_0, \quad U_0 = e^{-iH_0 t/\hbar}$$

证明

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle_I &= -H_0 e^{iH_0 t/\hbar} |\Psi(t)\rangle + e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} (H_0 + V) |\Psi(t)\rangle \\ &= e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} |\Psi(t)\rangle \end{aligned}$$

于是证得方程(1)。同理证得方程(2)。

“相互作用”表象

在相互作用表象考虑测量，我们只须研究 $A_I(t)$ 在 $|\Psi(t)\rangle_I$ 的期望值，测量结果不随时间改变

$$\bar{A} = \langle \Psi_I | A_I | \Psi_I \rangle = \langle \Psi_S(t) | A | \Psi_S(t) \rangle = \langle \Psi(0) | A_H(t) | \Psi(0) \rangle$$

对于不含时的哈密顿量 H

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar}$$

是以下薛定谔方程的解

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = H U(t)$$

“相互作用”表象

如果体系的初态 $|\Psi(0)\rangle = \sum c_n |n\rangle$

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

则

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= U(t)|\Psi(0)\rangle = \sum c_n e^{-iHt/\hbar} |n\rangle \\ &= \sum c_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \end{aligned}$$

因此，求解保守量子系统的时间演化，只须对初态做本征值展开

在海森堡表象中求解时间演化问题

对于谐振子系统 $H = \hbar\omega a^+ a$, $a(t)$ 的海森堡方程

$$\dot{a}(t) = \frac{1}{i\hbar} [a, H] = -i\omega a(t)$$

于是有

$$a(t) = a e^{-i\omega t}, \quad a^+(t) = a^+ e^{i\omega t}$$

于是坐标随时间变化为

$$x(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a(t) + a^+(t)) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a e^{-i\omega t} + a^+ e^{i\omega t})$$

在海森堡表象中求解时间演化问题

对于初态为实相干态 $|\Psi(0)\rangle = |\alpha\rangle (\alpha \in \mathbb{R})$, $x(t)$ 的平均值

$$\langle a \rangle = \langle a^+ \rangle = \alpha$$

$$\langle x(t) \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \alpha \cos\omega t$$

这恰好与经典谐振子质心运动方式一致

在海森堡表象中求解时间演化问题

它的涨落代表波包宽度

$$\langle a^+ a \rangle = \alpha \langle a^+ \rangle = \alpha^2$$

$$\langle a^2 \rangle = \langle a^{+2} \rangle = \alpha^2$$

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle a^2 e^{-2i\omega t} + a^{+2} e^{2i\omega t} + 2a^+ a + 1 \rangle$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \alpha^2 (2\cos 2\omega t + 2) + \frac{\hbar}{2m}$$

$$= \frac{\hbar}{m\omega} \alpha^2 (\cos 2\omega t + 1) + \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$= \frac{2\hbar}{m\omega} \alpha^2 \cos^2 \omega t + \frac{\hbar}{2m}$$

$$\langle \Delta^2 x(t) \rangle = \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

涨落宽度不变，所以相干态是最接近经典的状态

2.4 演化算子的计算：精确解

任何一个时刻的态函数 $|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle$

算符 A 在 t 时刻在海森堡表象写作

$$A(t) = U^\dagger(t) A U(t)$$

其中

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = H U(t)$$

$$U(0) = I$$

I. Rabi振荡:二能级体系在外场驱动下的演化

在以下交变磁场中

$$\vec{B} = B_0 \vec{e}_z + \vec{B}_\perp \equiv B_0 \vec{e}_z + B_1 (\vec{e}_x \cos \omega t + \vec{e}_y \sin \omega t)$$

自旋（或二能级系统）的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2} \mu g \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

其中，泡利矩阵

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

I. Rabi振荡:二能级体系在外场驱动下的演化

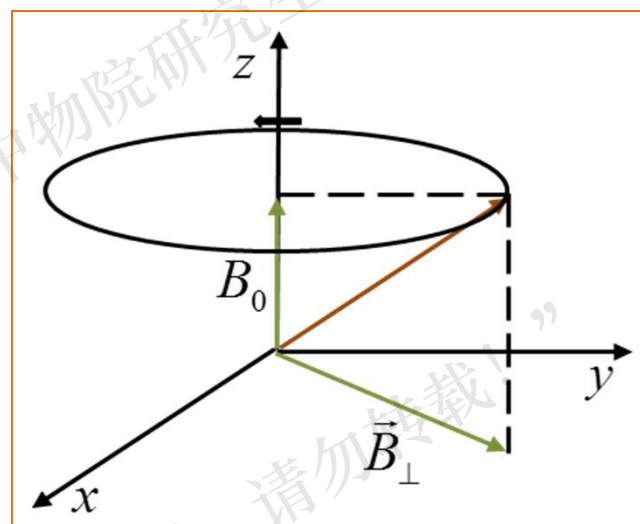
哈密顿量的矩阵表示为

$$H = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix}$$

$$\equiv \frac{\hbar}{2} [\omega_0 \sigma_3 + \omega_1 \sigma_1 \cos \omega t + \omega_1 \sigma_2 \sin \omega t]$$

其中

$$\hbar\omega_0 = \mu g B_0, \hbar\omega_1 = \mu g B_1$$



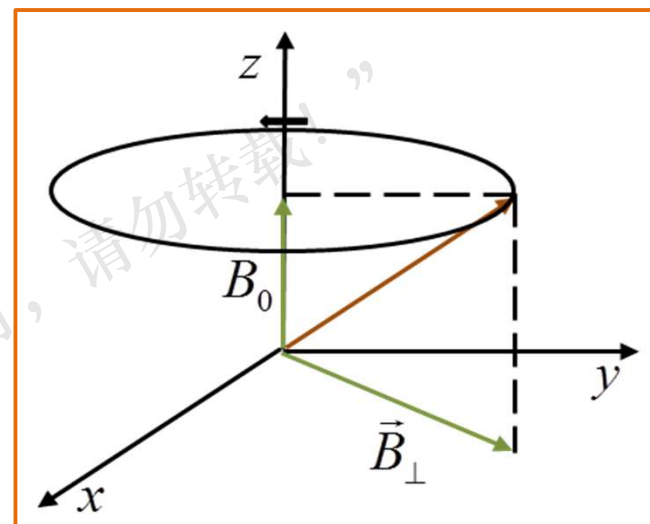
I. Rabi振荡:二能级体系在外场驱动下的演化

为了求解引入旋转坐标变换（逆时针为正方向）

$$U_R(t) \equiv R_Z(t)U(t) \equiv e^{\frac{i\omega t\sigma_3}{2}}U(t)$$

绕z轴的转动有矩阵表示

$$R_Z(t) = e^{\frac{i\omega t\sigma_3}{2}} = \begin{pmatrix} e^{\frac{i\omega t}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\omega t}{2}} \end{pmatrix}$$



绕z轴转动的作用

$$\begin{cases} R_Z(t)\sigma_x R_Z^\dagger(t) = \sigma_x \cos\omega t - \sigma_y \sin\omega t \\ R_Z(t)\sigma_y R_Z^\dagger(t) = \sigma_y \cos\omega t + \sigma_x \sin\omega t \end{cases}$$

一般时变坐标系中的等效薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = H U(t)$$

变换R: $U_R = R U,$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_R = H_R U_R$$

有效哈密顿量

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_R &= i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} R \right) U + i\hbar R \left(\frac{\partial}{\partial t} U \right) \\ &= i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} R \right) R^+ U_R + R H U \\ &= \left(i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} R \right) R^+ + R H R^+ \right) U_R \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_R &= i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} R \right) R^+ + R H R^+ \\ &= R H R^+ - i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} R^+ \right) R \end{aligned}$$

I. Rabi振荡:二能级体系在外场驱动下的演化

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = H U(t) \qquad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_R(t) = H_R U_R(t)$$

有效哈密顿量

$$\begin{aligned} H_R &= R_z(t) H R_z^\dagger(t) - i\hbar R_z(t) \frac{\partial}{\partial t} R_z^\dagger(t) \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} \omega_0 \sigma_z + \omega_1 \cos \omega t [\sigma_x \cos \omega t - \sigma_y \sin \omega t] \\ + \omega_1 \sin \omega t [\sigma_y \cos \omega t + \sigma_x \sin \omega t] \end{bmatrix} - \frac{\hbar}{2} \omega \sigma_z \\ &= \frac{\hbar}{2} [\omega_0 \sigma_z + \omega_1 \sigma_x] - \frac{\hbar}{2} \omega \sigma_z = \frac{\hbar}{2} [(\omega_0 - \omega) \sigma_z + \omega_1 \sigma_x] \end{aligned}$$

I. Rabi振荡:二能级体系在外场驱动下的演化

旋转坐标系中的有效演化矩阵

$$\begin{aligned} U_R(t) &= e^{-\frac{iH_R t}{\hbar}} = e^{-\frac{it}{2}[(\omega_0 - \omega)\sigma_z + \omega_1 \sigma_x]} \\ &= \cos \Omega t - i \frac{\omega_0 - \omega}{2\Omega} \sin \Omega t \sigma_z - i \frac{\omega_1}{2\Omega} \sin \Omega t \sigma_x \end{aligned}$$

$$\Omega = \sqrt{\frac{(\omega_0 - \omega)^2}{4} + \frac{\omega_1^2}{4}}$$

$$e^{i\vec{\sigma} \cdot \vec{\theta}} = \cos \theta + i\vec{\sigma} \cdot \hat{\theta} \sin \theta, \theta = |\vec{\theta}|, \hat{\theta} = \vec{\theta}/\theta$$

I. Rabi振荡:二能级体系在外场驱动下的演化

$$\begin{aligned} U(t) &= R_Z^+(t) U_R(t) \\ &= e^{-\frac{i\omega t \sigma_z}{2}} \left(\cos\Omega t - i \frac{\omega_0 - \omega}{2} \sin\Omega t \sigma_z - i \frac{\omega_1}{2\Omega} \sin\Omega t \sigma_x \right) \\ &= \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\omega t}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\omega t}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\Omega t - i \frac{\omega_0 - \omega}{2} \sin\Omega t & -i \frac{\omega_1}{2\Omega} \sin\Omega t \\ -i \frac{\omega_1}{2\Omega} \sin\Omega t & \cos\Omega t + i \frac{\omega_0 - \omega}{2} \sin\Omega t \end{pmatrix} \end{aligned}$$

I. Rabi振荡:二能级体系在外场驱动下的演化

体系开始是处于下能级

$$|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

经过时间 t 后处于 $|\Psi(t)\rangle = U(t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} =$

$$\begin{pmatrix} -i \frac{\omega_1}{2\Omega} \sin\Omega t e^{-\frac{i\omega t}{2}} \\ \left(\cos\Omega t + i \frac{\omega_0 - \omega}{2\Omega} \sin\Omega t \right) e^{\frac{i\omega t}{2}} \end{pmatrix}$$

I. Rabi振荡:二能级体系在外场驱动下的演化

处在激发态的几率为

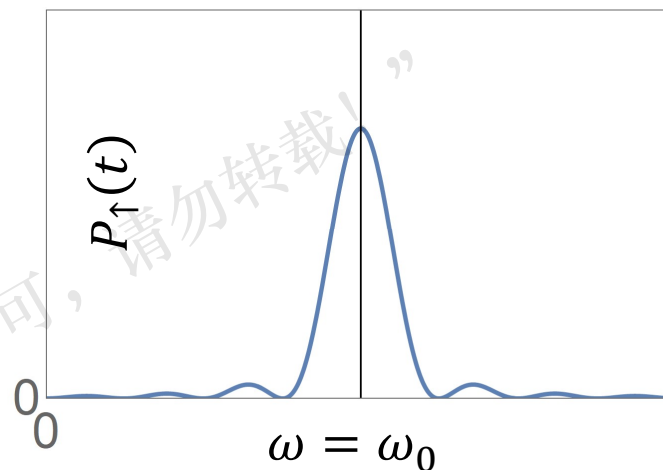
$$\text{上能态} |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$P_{\uparrow}(t) = |\langle(1,0)|\Psi(t)\rangle|^2 = \frac{\omega_1^2}{4\Omega^2} \sin^2 \Omega t$$

$$\Omega = \sqrt{\frac{(\omega_0 - \omega)^2}{4} + \frac{\omega_1^2}{4}}$$

当 $\omega = \omega_0$, $P_{\uparrow}(t)$ 振幅变得很大

$$P_{\uparrow}^m(t) = \sin^2 \frac{\omega_1}{2} t$$



发生共振，今称之为Rabi共振，它是核磁共振技术的基础

II. 受迫谐振子的时间演化

在外力 $f(t)$ 作用下，一维受迫谐振子的哈密顿量为

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + f(t)x$$

通过正则变换

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (m\omega x + ip) \quad , \quad x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger)$$

由升降算子表达受迫振子的哈密顿量

$$H = \hbar\omega a^\dagger a + F(t)a^\dagger + F^*(t)a$$

$$F(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} f(t)$$

II. 受迫谐振子的时间演化

再取 $H_0 = \hbar\omega a^+ a$ ，则在相互作用表象

$$\begin{aligned} H_I &= e^{-H_0 t / i\hbar} (F(t) a^+ + F^*(t) a) e^{H_0 t / i\hbar} \\ &= F(t) e^{i\omega t} a^+ + F^*(t) a e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

求解相互作用表象中的演化方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t) = H_I U_I(t)$$

设

$$U_I(t) = e^{i\lambda(t)} e^{ix(t)a^+} e^{iy(t)a}$$

II. 受迫谐振子的时间演化

代入 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t) U_I^{-1}(t) = H_I$

$$i\hbar [i\dot{\lambda}(t) + i\dot{x}(t)a^+ + i\dot{y}(t)a + x\dot{y}] = F(t)e^{i\omega t}a^+ + F^*(t)a e^{-i\omega t}$$

$$\frac{\partial U_I(t) U_I^{-1}(t)}{\partial t} = [i\dot{\lambda}(t)U_I(t) + i\dot{x}(t)a^+ U_I(t) + e^{i\lambda(t)}e^{ix(t)a^+}i\dot{y}(t)a e^{iy(t)a}]U_I^{-1}(t)$$

$$= [i\dot{\lambda}(t) + i\dot{x}(t)a^+ + i\dot{y}(t)e^{ix(t)a^+}a e^{-ix(t)a^+}]$$

$$= [i\dot{\lambda}(t) + i\dot{x}(t)a^+ + i\dot{y}(t)e^{ix(t)a^+}(e^{-ix(t)a^+}a - ix(t)e^{-ix(t)a^+})]$$

$$= i\dot{\lambda}(t) + i\dot{x}(t)a^+ + i\dot{y}(t)a + x\dot{y}$$

其中用到 $[a, F(a^+)] = \frac{\partial F(a^+)}{\partial a^+}$

II. 受迫谐振子的时间演化

对比得到

$$\begin{cases} i\dot{\lambda}(t) + x\dot{y} = 0 \\ -\hbar\dot{x}(t) = F(t)e^{i\omega t} \\ -\hbar\dot{y}(t) = F^*(t)e^{-i\omega t} \end{cases}$$

解得

$$x(t) = y^*(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t F(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau$$
$$i\lambda(t) = \int_0^t x(\tau) \dot{x}^*(\tau) d\tau$$

$$\begin{aligned} i\lambda(t) &= -\int_0^t x(\tau)\dot{y}(\tau)d\tau \\ &= -x(t)y(t) + \int_0^t \dot{x}(\tau)y(\tau)d\tau \\ &= -|x(t)|^2 - i\lambda^*(t) \end{aligned}$$

于是

$$\operatorname{Re}(i\lambda(t)) = -\frac{1}{2}|x(t)|^2$$

由公式

$$e^A e^B = e^{\frac{1}{2}[A,B]} e^{A+B},$$

$$[[A, B], A] = 0, [[A, B], B] = 0$$

相互作用表象中受迫谐振子的演化算符是平移算子

$$\begin{aligned} U_I(t) &= e^{i\lambda(t)} e^{ix(t)a^+} e^{ix^*(t)a} \\ &= e^{i\lambda(t) + \frac{1}{2}|x(t)|^2} e^{\alpha a^+ - \alpha^* a} \end{aligned}$$

$$\propto e^{\alpha a^+ - \alpha^* a} = D(\alpha) \quad (\alpha = ix(t))$$

II. 受迫谐振子的时间演化

这表明 $U_I(t)$ 是一个平移算子，因此在力 $f(t)$ 的驱动下，体系会从真空态演化到一个相干态上，即

$$\begin{aligned} |\varphi(t)\rangle &= e^{-iH_0 t/\hbar} U_I(t) |0\rangle \propto e^{-i\omega a^+ a t} D(\alpha) |0\rangle \\ &= |\alpha e^{-i\omega t}\rangle \end{aligned}$$

习题

依以上代数方法，求解

$$H = B_x(t)L_x + B_y(t)L_y + B_z(t)L_z$$

的时间演化

求解时间演化的一般代数方法

Wei-Norman定理: (代数动力学方法)

若体系的哈密顿量可以写为一个李代数生成元

$\{I_\alpha | \alpha = 1, 2, \dots, N\}$ 的线性组合

$$H(t) = \sum C_\alpha(t) I_\alpha$$

则演化矩阵 $U(t)$ 是李群一般元素，可表达为单参数李群元素的乘积

$$U(t) = \prod_{\alpha=1}^N e^{X_\alpha(t) I_\alpha}$$

问题转化为求解 $\{X_\alpha(t)\}$ 的方程组

代数动力学一般推理

若

$$H(t) = \sum C_{\alpha}(t) I_{\alpha}$$

且 $L_M = \{I_{\alpha}\}$ 不封闭则可以把 L_M 扩展成李代数 $L = L_M \oplus \{[I_{\alpha}, I_{\beta}]\}$

$$U(t) = \prod_{\alpha=1}^M e^{X_{\alpha}(t) I_{\alpha}} \prod_{\beta=1}^{N-M} e^{X_{\beta}(t) I_{\beta}}$$

例子: $H = f(t) a^+ + f(t) a \quad L_2 = \{a, a^+\}$

$$[a, a^+] = I, [I, a^+(a)] = 0 \quad U(t) = e^{iX(t)} e^{X_+(t) a^+} e^{X_-(t) a}$$

2.5 量子体系的演化：Dyson展开

如果哈密顿量 $H(t)$ 依赖于时间，在大多数情况下 $U(t)$ 是无法精确地给出显式解。为此，我们必须发展一些近似展开的方法

$$\frac{\partial}{\partial t} U(t) = \frac{1}{i\hbar} H U(t)$$

用迭代方法

$$\begin{aligned} U(t) &= 1 + \int_0^t \frac{1}{i\hbar} H(t_1) U(t_1) dt_1 \\ &= 1 + \int_0^t \frac{1}{i\hbar} H(t_1) \left[1 + \int_0^{t_1} \frac{1}{i\hbar} H(t_2) U(t_2) dt_2 \right] dt_1 \\ &= 1 + \int_0^t dt_1 \frac{H(t_1)}{i\hbar} + \int_0^t \int_0^{t_1} dt_1 dt_2 \frac{H(t_1)H(t_2)}{(i\hbar)^2} + \int_0^t \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} dt_1 dt_2 dt_3 \frac{H(t_1)H(t_2)H(t_3)}{(i\hbar)^3} \end{aligned}$$

2.5 量子体系的演化：Dyson展开

利用阶梯函数 $\theta(t) = \begin{cases} 1 & t > 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}$ ，前式第三项可以重新写为

$$\iint_{0 < t_2 < t_1}^t dt_1 dt_2 \frac{H(t_1)H(t_2)}{(i\hbar)^2} = \iint_0^t dt_1 dt_2 \theta(t_1 - t_2) \frac{H(t_1)H(t_2)}{(i\hbar)^2}$$

同样，任意项 $\int_0^t \cdots \int_0^{t_n} dt_1 \cdots dt_n \frac{H(t_1)H(t_2) \cdots H(t_n)}{(i\hbar)^n}$

$$\begin{aligned} &= \int_0^t \cdots \int_0^t dt_1 \cdots dt_n \theta(t_1 - t_2) \cdots \theta(t_{n-1} - t_n) \frac{H(t_1)H(t_2) \cdots H(t_n)}{(i\hbar)^n} \\ &= \frac{1}{n!} \int_0^t \cdots \int_0^t dt_1 \cdots dt_n \frac{\mathcal{T}[H(t_1)H(t_2) \cdots H(t_n)]}{(i\hbar)^n} \end{aligned}$$

其中用到了记号

$$\mathcal{T}[H(t_1)H(t_2) \cdots H(t_n)]$$

$$= \sum_{p \in S_n} \theta(t_{p(1)} - t_{p(2)}) \cdots \theta(t_{p(n-1)} - t_{p(n)}) H(t_{p(1)})H(t_{p(2)}) \cdots H(t_{p(n)})$$

2.5 量子体系的演化：Dyson展开

我们将 $\mathcal{T}[H(t_1)H(t_2)\cdots H(t_n)]$ 记为 $H(t_1)H(t_2)\cdots H(t_n)$ 的编时积

当 $t_{p(1)} \geq t_{p(2)} \geq \cdots \geq t_{p(n)}$

$$\mathcal{T}[H(t_1)H(t_2)\cdots H(t_n)] = H(t_{p(1)})H(t_{p(2)})\cdots H(t_{p(n)})$$

$$\begin{aligned} U(t) &= 1 + \int_0^t \frac{1}{i\hbar} H(t_1)U(t_1)dt_1 + \frac{1}{2!} \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 \frac{\mathcal{T}[H(t_1)H(t_2)]}{(i\hbar)^2} \\ &\quad + \frac{1}{n!} \int_0^t \cdots \int_0^t dt_1 \cdots dt_n \frac{\mathcal{T}[H(t_1)H(t_2)\cdots H(t_n)]}{(i\hbar)^n} \\ &\equiv \mathcal{T} \exp \left[\frac{1}{i\hbar} \int_0^t H(t)dt \right] \end{aligned}$$

2.5 量子体系的演化：Dyson展开

上述演化矩阵的级数展开被称为Dyson展开，Dyson把它用在量子电动力学，给出一个容易理解和计算的形式。

我们可以通过微扰论方法给出演化算子的近似解，假设体系的哈密顿 H 可以分为不含时的 H_0 和微扰 V

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = (H_0 + V)U(t)$$

有解 $U(t) = \sum U^{(n)}(t)$

2.5 量子体系的演化：Dyson展开

其中每一阶近似解满足递推的微分方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^{(0)}(t) = H_0 U^{(0)}(t) \quad (1)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^{(n)}(t) = H_0 U^{(n)}(t) + V(t) U^{(n-1)}(t) \quad (2)$$

$$U^{(0)}(0) = I, U^{(n)}(0) = 0, n > 1$$

方程 (1) 的解

$$U^{(0)}(t) = \exp\left(\frac{H_0}{i\hbar} t\right)$$

2.5 量子体系的演化：Dyson展开

一阶解满足方程 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^{(1)}(t) = H_0 U^{(1)}(t) + V(t) U^{(0)}(t)$

令 $U^{(1)}(t) = \exp\left(\frac{H_0}{i\hbar} t\right) W(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} W(t) = e^{\frac{iH_0}{\hbar} t} V(t) e^{-\frac{iH_0}{\hbar} t}$$

$$U^{(1)}(t) = e^{-\frac{iH_0}{\hbar} t} \int_0^t e^{\frac{iH_0}{\hbar} t_1} \frac{V(t_1)}{i\hbar} e^{-\frac{iH_0}{\hbar} t_1} dt_1$$

从这一级微扰的演化矩阵出发，我们可以计算系统的跃迁矩阵元。

2.5 量子体系的演化：Dyson展开

由此，可计算从 H_0 的本征态 $|n\rangle$ 到 $|m\rangle$ 的跃迁几率

$$\begin{aligned} P_{mn} &= |\langle m|U(t)|n\rangle|^2 \cong |\langle m|U^{(0)}(t)|n\rangle + \langle m|U^{(1)}(t)|n\rangle|^2 \\ &= \left| \left\langle m \left| e^{-\frac{iH_0}{\hbar}t} \int_0^t e^{\frac{iH_0}{\hbar}t_1} \frac{V(t_1)}{i\hbar} e^{-\frac{iH_0}{\hbar}t_1} dt_1 \right| n \right\rangle \right|^2 \\ &= \left| \int_0^t \langle m|V(t_1)|n\rangle \frac{e^{-i(E_n-E_m)t_1/\hbar}}{i\hbar} dt_1 \right|^2 \end{aligned}$$

这恰是通常量子力学含时微扰给出的结果。

2.5 量子体系的演化：Dyson展开

考虑哈密顿量

$$H = H_0 + \lambda V(t)$$

将薛定谔方程

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

的解展开作

$$|\Psi(t)\rangle = \sum \lambda^k |\Psi^{[k]}(t)\rangle$$

则

$$i\hbar \sum \lambda^k \frac{\partial}{\partial t} |\Psi^{[k]}(t)\rangle = \sum \lambda^k H_0 |\Psi^{[k]}(t)\rangle + \sum \lambda^{k+1} V |\Psi^{[k]}(t)\rangle$$

2.5 量子体系的演化：Dyson展开

得到可递推求解的方程组

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi^{[0]}(t)\rangle = H_0 |\Psi^{[0]}(t)\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi^{[k]}(t)\rangle = H_0 |\Psi^{[k]}(t)\rangle + V |\Psi^{[k-1]}(t)\rangle, k = 1, 2, \dots$$

用 H_0 的本征态 $|n\rangle$ 展开各级波函数

$$|\Psi^{[k]}(t)\rangle = \sum c_n^{[k]} e^{-iE_n t} |n\rangle$$

从而0阶解

$$|\Psi^{[0]}(t)\rangle = \sum c_n^{[0]} e^{-iE_n t} |n\rangle$$

2.5 量子体系的演化：Dyson展开

一阶

$$\text{left} = \sum \left[i\dot{C}_n^{[1]} e^{-iE_n t} |n\rangle + E_n C_n^{[1]} e^{-iE_n t} |n\rangle \right]$$

$$\text{right} = \sum \left[E_n C_n^{[1]} e^{-iE_n t} |n\rangle + V e^{-iE_n t} C_n^{[0]} |n\rangle \right]$$

从而有

$$i\dot{C}_n^{[1]}(t) = \sum \langle n|V|m\rangle e^{-i(E_n-E_m)t/\hbar} C_m^{[0]}$$

$$C_n^{[1]}(t) = -i \sum \int_0^t \langle n|V|m\rangle e^{-i(E_n-E_m)t'/\hbar} dt' C_m^{[0]}$$

以下分两种情况讨论这一微扰解

2.5 量子体系的演化：Dyson展开

情况I $\langle n|V|m\rangle \neq 0$ 有对角元, 则

$$C_n^{[1]}(t) = -i \int_0^t V_{nn}(t) dt C_n^{[0]} - i \sum_{m \neq n} C_m^{[0]} \int_0^t V_{mn}(t) e^{i(E_n - E_m)t} dt$$

情况II $\langle n|V|m\rangle = 0$ 没有对角元, 则

$$C_n^{[1]}(t) = -i \sum_{m \neq n} C_m^{[0]} \int_0^t V_{mn}(t) e^{i(E_n - E_m)t} dt$$

分部积分

$$\begin{aligned} -i \int_0^t V_{mn}(t) e^{i(E_n - E_m)t} dt &= \int_0^t V_{mn}(t) \frac{d[e^{i(E_n - E_m)t}]}{E_n - E_m} \\ &= \frac{e^{i(E_n - E_m)t} V_{mn}(t) - V_{mn}(0)}{E_n - E_m} + \int_0^t \frac{e^{i(E_n - E_m)t}}{E_n - E_m} dV_{mn}(t) \end{aligned}$$

2.5 量子体系的演化：Dyson展开

设初始时刻系统处于第 n 个本征态，则近似波函数

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iE_n t} |n\rangle + \sum C_m^{[1]} e^{-iE_m t} |m\rangle$$

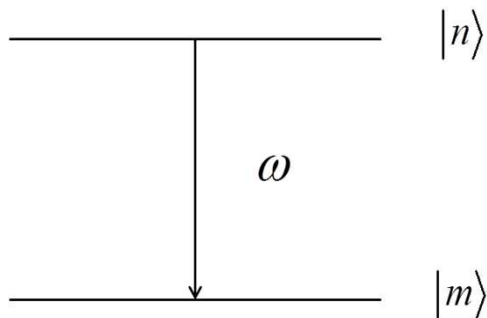
从 n 态跃迁到 m 态上的几率

$$P_{n \rightarrow m}(t) = |C_m^{[1]}|^2 = \left| \int_0^t V_{mn}(t) e^{i(E_n - E_m)t} dt \right|^2$$

设外势是一个单频驱动场 $V(t) = V_0 e^{-i\omega t} + \text{h. c.}$

$$\begin{aligned} C_n^{[1]}(t) &= i \int_0^t V_0 e^{i(E_n - E_m + \omega)t} dt - i \int_0^t V_0 e^{i(E_n - E_m - \omega)t} dt \\ &= V_{mn} \left[\frac{e^{i(E_n - E_m + \omega)t} - 1}{E_n - E_m + \omega} + \frac{e^{i(E_n - E_m - \omega)t} - 1}{E_n - E_m - \omega} \right] \end{aligned}$$

2.5 量子体系的演化：Dyson展开



若 $E_n > E_m$ 则上式第一项可忽略

$$P_{n \rightarrow m}(t) = \frac{4|V_{mn}|^2}{(E_n - E_m - \omega)^2} \sin^2 \left[\frac{1}{2} (E_n - E_m - \omega)t \right]$$

长时间近似下，当共振发生时 $P_{n \rightarrow m}(t) \rightarrow \infty$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{2\sin^2\left(\frac{1}{2}\Omega t\right)}{\pi t \Omega^2} \rightarrow \delta(\Omega)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2\sin^2\left(\frac{1}{2}\Omega t\right)}{\pi t \Omega^2} d\Omega = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = 1$$

2.5 量子体系的演化：Dyson展开

长时跃迁行为

$$P_{n \rightarrow m}(t) \rightarrow 4|V_{mn}|^2 \frac{\pi t}{2\hbar} \delta(E_n - E_m - \omega)$$

从 n 态跃迁到 m 态上的费米黄金规则

$$\Gamma(n \rightarrow m) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{P_{n \rightarrow m}(t)}{t} = |V_{mn}|^2 \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_n - E_m - \omega)$$

2.6 量子绝热近似方法

当系统的参数依赖于时间，很难给出薛定谔方程明显的解析解。当体系的参数**缓慢地**依赖于时间，我们可以通过所谓的量子绝热近似 (Quantum adiabatic approximation) 方法给出近似的解析解。

设体系的哈密顿量 $H(t) \equiv H[\lambda(t)]$ 是通过一组参数

$$\lambda(t) = [\lambda_1(t), \lambda_2(t), \dots, \lambda_n(t)]$$

依赖于时间 t 。设 $|n(t)\rangle \equiv |n[\lambda(t)]\rangle$ 是固定 t 时 $H(t)$ 的本征值为 E_n 的本征态。

2.6 量子绝热近似方法

因为 $\lambda(t)$ 为常数，薛定谔方程的解可以是

$$|\Psi(t)\rangle = \sum C_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$$

这里是 E_n 是常数，因此在能量依赖于时间时，作“常数变易”，令

$$|\Psi(t)\rangle = \sum C_n(t) \exp \left[-\frac{i \int_0^t E_n(t') dt'}{\hbar} \right] |n(t)\rangle$$

代入薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle \quad (2-2)$$

2.6 量子绝热近似方法

则 (2-2) 的左边

$$\sum \left[\begin{aligned} & \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_n(t) \right) \exp \left[-\frac{i \int_0^t E_n(t') dt'}{\hbar} \right] |n(t)\rangle + E_n(t) C_n(t) \\ & \exp \left[-\frac{i \int_0^t E_n(t') dt'}{\hbar} \right] |n(t)\rangle + C_n(t) \exp \left[-\frac{i \int_0^t E_n(t') dt'}{\hbar} \right] |\dot{n}(t)\rangle \end{aligned} \right]$$

而右边为 $\sum C_n(t) E_n(t) \exp \left[-\frac{i \int_0^t E_n(t') dt'}{\hbar} \right] |n(t)\rangle$

两边用 $\langle n(t)|$ 作内积

$$\dot{C}_n(t) + \langle n(t)|\dot{n}(t)\rangle C_n(t) = - \sum_{m \neq n} e^{i\Omega_{mn}(t)} \langle n(t)|\dot{m}(t)\rangle C_m(t) \quad (2-3)$$

其中 $|\dot{n}(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t} |n(t)\rangle$ $\Omega_{mn}(t) = \frac{\int_0^t [E_n(t') - E_m(t')] dt'}{\hbar}$

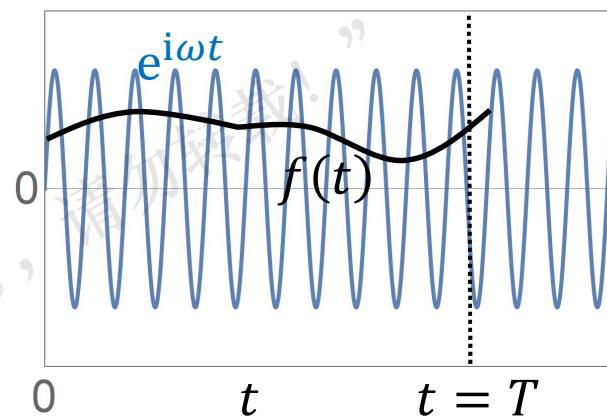
2.6 量子绝热近似方法

考察 (2-4) 其积分形式为

$$C_n(t) - C_n(0) + \int_0^t \langle n(t') | \dot{n}(t') \rangle C_n(t') dt' = - \sum_{m \neq n} \int_0^t e^{i\Omega_{mn}(t')} \langle n(t') | \dot{m}(t') \rangle C_m(t') dt'$$

注意到一个快速震荡的函数积分为零，即

$$\int_0^T f(t) e^{i\omega t} dt \xrightarrow{\omega \rightarrow \infty} 0$$



则当 $e^{i\Omega_{mn}(t)}$ 是一个振荡很快的函数，积分方程的右边趋近于零，则有

$$C_n(t) - C_n(0) + \int_0^t \langle n(t') | \dot{n}(t') \rangle C_n(t') dt' \rightarrow 0 \quad (2-5)$$

2.6 量子绝热近似方法

基于分部积分严格证明上述结论：

$$\begin{aligned} \int_0^t e^{i\Omega_{mn}(t')} \langle m|\dot{n}\rangle C_n(t') dt' &= \int_0^t \frac{1}{i\dot{\Omega}_{mn}(t')} \frac{d}{dt} [e^{i\Omega_{mn}(t')}] \langle m|\dot{n}\rangle C_n(t') dt' \\ &= \frac{\hbar \langle m|\dot{n}\rangle}{i(E_n - E_m)} e^{i\Omega_{mn}(t')} C_n(t') \Big|_0^t - \int_0^t \frac{d}{dt} \left[\frac{\langle m|\dot{n}\rangle C_n(t')}{i\dot{\Omega}_{mn}(t')} \right] e^{i\Omega_{mn}(t')} dt' \end{aligned}$$

当

$$\left| \frac{\hbar \langle m|\dot{n}\rangle}{E_n - E_m} \right| = \left| \frac{\langle m|\dot{n}\rangle}{\omega_n - \omega_m} \right| \ll 1$$

绝热近似条件

时，绝热近似条件满足，上述方程左边第一项为零，第二项是更高阶的项，亦为零。

2.6 量子绝热近似方法

积分方程在绝热近似条件下，变为微分方程

$$\dot{C}_n(t) + \langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle C_n(t) \cong 0$$

其解为

$$C_n(t) = e^{i\gamma_n(t)} C_n(0),$$

其中相位（称作**几何相位**）

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle n(t') | \dot{n}(t') \rangle dt'$$

2.6 量子绝热近似方法

在参数空间 V 中闭合回路 $C: \{\lambda(t) | \lambda(0) = \lambda(T)\}$ 上积分

$$\gamma_n[C] \equiv \gamma_n(T) = i \sum_{j=1}^N \int_0^T \left\langle n \left| \frac{\partial}{\partial \lambda_j} \right| n \right\rangle d\lambda_j \equiv i \oint_C \langle n | \nabla | n \rangle d\vec{\lambda}$$

称为Berry几何相位，而 $\int_0^t E_n(t') dt'$ 称为动力学相位。

因此，时间缓变参数系统薛定谔方程的解为

$$|\Psi(t)\rangle = \sum C_n(0) e^{i\gamma_n(t)} e^{-i \int_0^t E_n(t') dt'} |n(t)\rangle$$

2.6 量子绝热近似方法

如果 $C_m(0) = \delta_{nm}$ ($t = 0$ 时系统在第 n 个能级上),
 $|\Psi(t)\rangle \propto |n(t)\rangle$ 意味着序号 n 不变, 由以上结果给出量子绝热定理。

当体系初始时刻处于第 n 个本征态, 则 t 时刻仍然处于此时的第 n 个本征态 $|n(t)\rangle$ 上, 波函数为

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)} e^{-i \int_0^t E_n(t') dt'} |n(t)\rangle$$

其中 $e^{i\gamma_n(t)}$ 和 $e^{-i \int_0^t E_n(t') dt'}$ 分别对应几何相因子和动力学相因子。

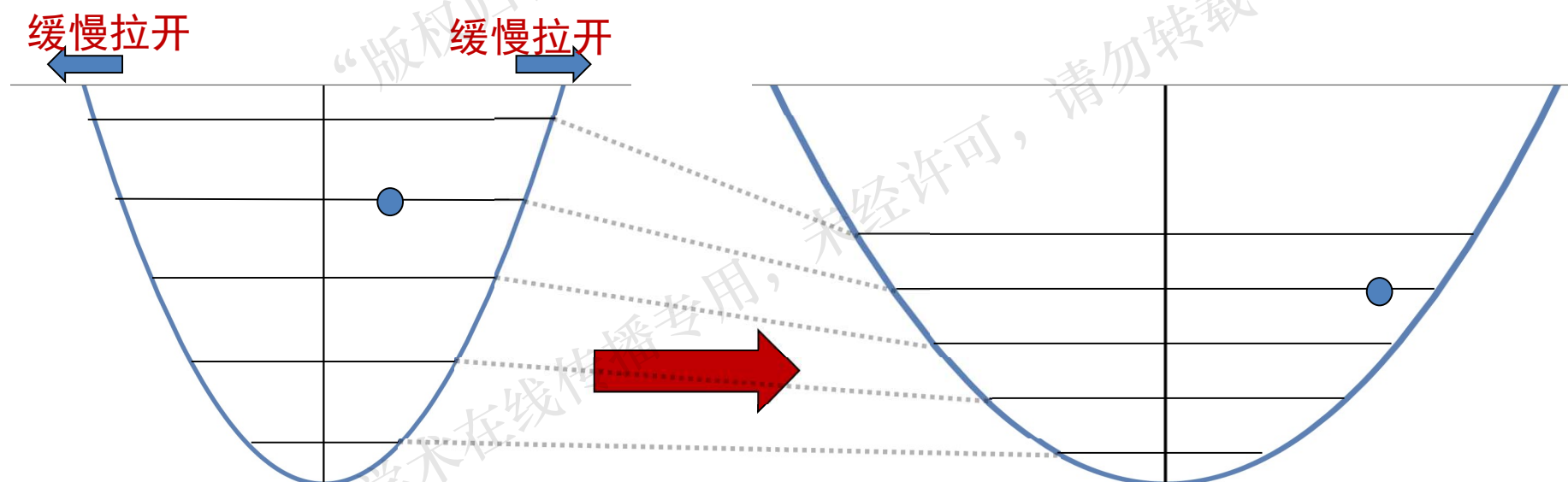
量子绝热定理

设系统有随时间缓变的哈密顿量 $H = H(t) = H[\lambda(t)]$,

若初始时刻 $t = 0$ 处 $H(0)$ 的本征态是 $|n(t = 0)\rangle$, 那么如果参数

$\lambda(t)$ 变化足够缓慢, 在 t 时刻系统所处状态

$$|\psi(t)\rangle \cong |n(t)\rangle$$



绝热定理的物理解释

I. 为什么称为量子绝热近似？

在统计力学中，熵 S 取决于粒子在不同能级 $|1\rangle, \dots |n\rangle$ 上的分布，若在 N 个能级 $|n(t)\rangle$ 上分布几率为 $W_1, \dots W_n$ ，则其冯诺意曼熵（在平衡态正好是热力学熵）为

$$S = -K \sum W_n \ln W_n$$

参数绝热变化不改变布居数，熵不变，是宏观的热力学绝热过程。足够慢地改变系统的参数，让系统相对快地弛豫，每一时刻系统将处于一个准静态上。

微观的量子力学绝热将导致宏观的热力学绝热，但反之不然。

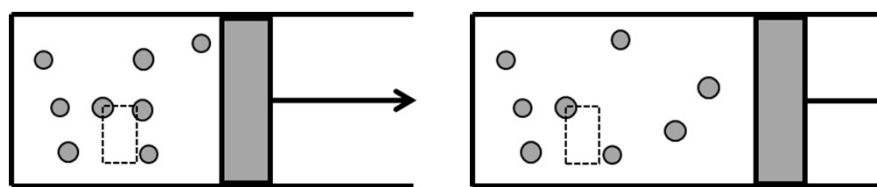
绝热定理的物理解释

量子绝热定理的命名，有其历史原因(在旧量子论中起过重大作用)，而且有着重要物理。如果把微观状态视为单粒子的能级，熵 S 取决于布居数 W_n ，

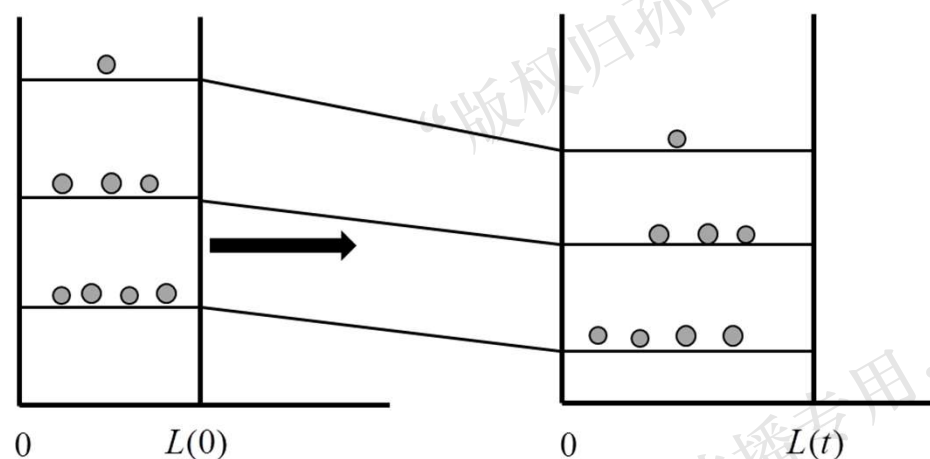
$$S = -K \sum W_n \ln W_n$$

当参量(如容器体积)缓慢变换不激发粒子的跃迁，诸粒子会以相同的布居保留在变化后的能级上，保证了体系熵不变。因此，在统计热力学的意义上，这的确是一个绝热过程。

绝热定理的物理解释



从宏观热力学的角度看，足够慢地拉动左图的活塞，改变气体体积时，气体会始终保持在热力学平衡态上。



微观图像可解释为无限深势阱的壁被绝热地拉动，原来在第 n 能级上粒子，仍保持在第 n 个能级上，从而导致热力学的绝热过程。

与统计热力学意义上的绝热过程类比

绝热定理的物理解释

绝热条件的定量含义：

$$\langle n | \dot{m} \rangle = \frac{\left\langle n \left| \frac{\partial}{\partial t} H(t) \right| m \right\rangle}{(E_n - E_m)}$$

代表哈密顿量引起的变化，而且瞬时的能级差 $E_m(t) - E_n(t)$ 代表了内部跃迁特征频率。

量子绝热条件：内部变化的快慢大于外部变化，参数改变“速率”小于特征时间，体系永远保留原来“轨道”上，不发生跃迁。

直观地看来， $\lambda(t)$ 变化足够慢就能保证绝热近似成立；

事实并非如此， $\lambda(t)$ 慢变只是绝热近似成立的必要条件，而不是充分条件。

绝热定理的物理解释

II. 量子绝热近似中，“足够缓慢”的物理含义

注意到，对 $H(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle$ 微分

$$\dot{H}(t)|n(t)\rangle + H(t)|\dot{n}(t)\rangle = \dot{E}_n(t)|n(t)\rangle + E_n(t)|\dot{n}(t)\rangle$$

左乘 $\langle m(t)|$

$$\langle m|\dot{n}\rangle = \frac{\langle m|\dot{H}|n\rangle}{E_n - E_m}$$

则绝热条件变为

$$\left| \frac{\hbar \langle m|\dot{H}|n\rangle}{(E_n - E_m)^2} \right| \ll 1$$

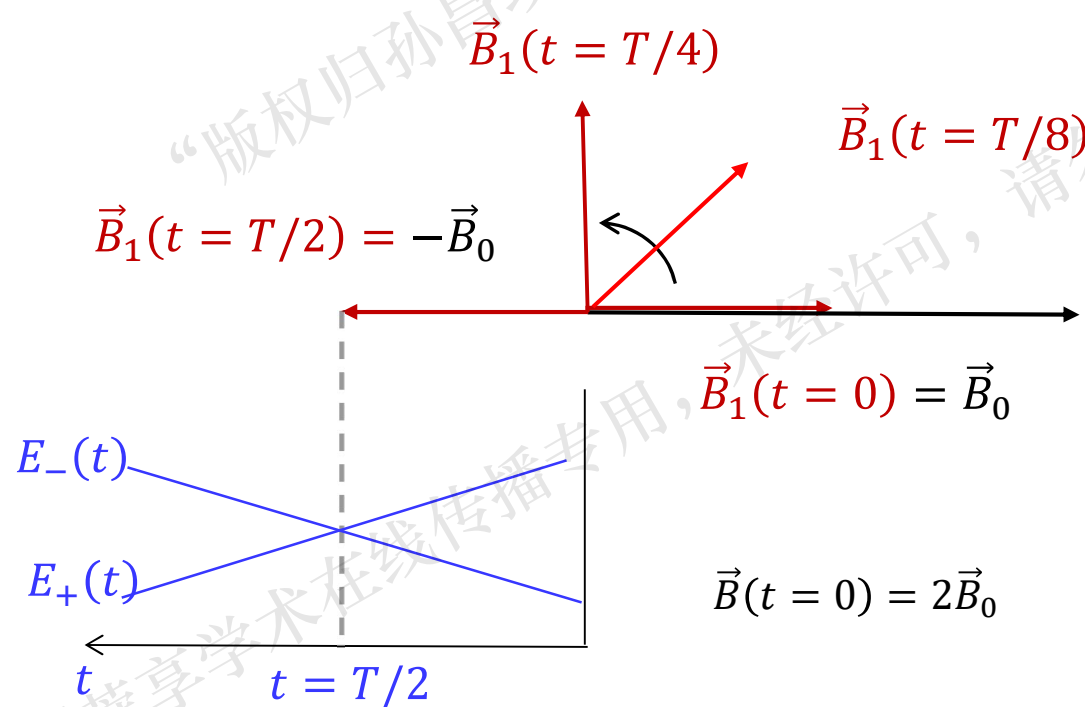
这表明哈密顿变化的矩阵元远远小于能量差平方， $E_m - E_n$ 代表系统的本征振荡速度，它要远远大于哈密顿改变的速率。

绝热定理的物理解释

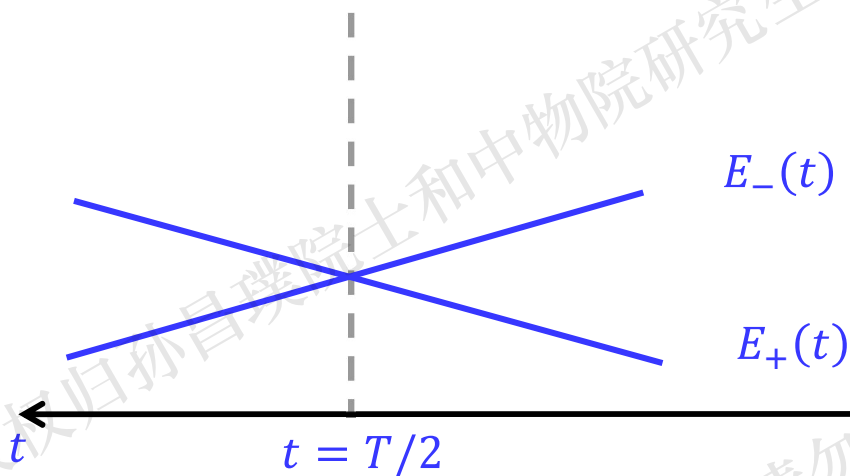
自旋为1/2 的粒子在磁场中运动：

$$\vec{B}(t) = \vec{B}_1(t) + \vec{B}_0,$$

$\vec{B}_1(t)$ 与 $\vec{B}_0$ 大小相同



绝热定理的物理解释



两个瞬时能级 $E_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \mu |\vec{B}(t)|$. 不管旋转磁场变化得多么慢，总有一个时刻 $|\vec{B}(t)| = 0$ ，此时能级交叉，也就是说绝热条件全过程中不会一直成立。

不能凭直觉断言绝热条件成立。

绝热定理的几何解释

III. 为什么称附加的相因子 $\gamma_n[C]$ 是几何的?

缓变磁场

$$B(t) = (B_x(t), B_y(t), B_z(t)) = B(\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$$

系统哈密顿量

$$H = \mu \vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \mu B(t) \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

其本征函数

$$|\varphi_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \quad |\varphi_-\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ -\cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}$$

绝热定理的物理解释

$$E_{\pm} = \pm \mu |B(t)|$$

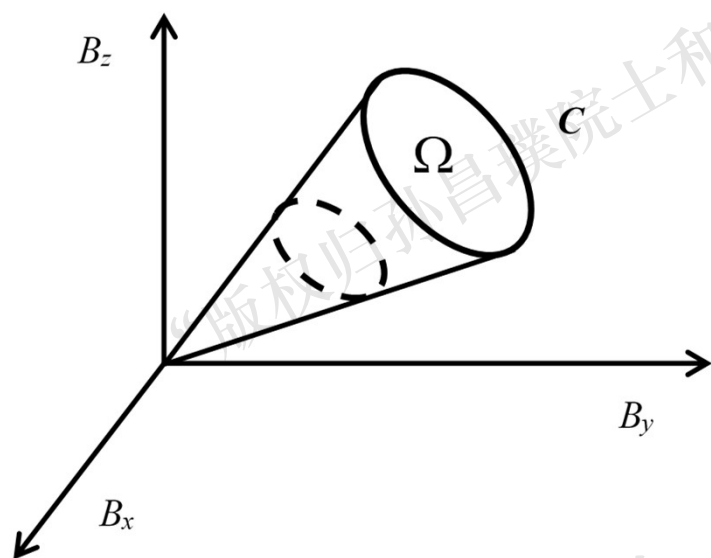
在参数空间 $\{\vec{B}\}$ 上计算几何相因子：

$$\gamma_+ = -\frac{1}{2} \int_0^T \dot{\varphi} \left(\sin^2 \frac{\theta}{2} - \cos^2 \frac{\theta}{2} \right) dt = \frac{1}{2} \oint_C \cos \theta d\varphi$$

$$\gamma_- = -\frac{1}{2} \int_0^T \dot{\varphi} \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) dt = -\frac{1}{2} \oint_C \cos \theta d\varphi$$

绝热定理的几何解释

假设 Ω_C 是 C 相对于坐标原点围成的立体角



$$\gamma_{\pm} = \pm \frac{\Omega_C}{2}$$

几何相因子 $\gamma_{\pm}[C]$ 只依赖于 C 围成的立体角大小，与选围道 C 的变化方式无关。对另一个闭路 C' ，只要对应的立体角一样，有 $\gamma_{\pm}[C] = \gamma_{\pm}[C']$

量子绝热诱导规范场

Berry几何位相的几何拓扑特征还体现在它具有规范不变性。定义 $U(1)$ 诱导规范势

$$\vec{A} = \langle n[\lambda] | \vec{\nabla}_\lambda n[\lambda] \rangle$$

几何相位因子

$$F = e^{-i\gamma_n(T)} \equiv \exp \left[\oint A_n(\lambda) d\vec{\lambda} \right]$$

量子绝热近似方法

进行本征方程允许的变换

$$H[\lambda]|n[\lambda]\rangle = E_n[\lambda]|n[\lambda]\rangle$$

$$|n[\lambda]\rangle \rightarrow |n[\lambda]\rangle' = e^{i\theta(\lambda)}|n[\lambda]\rangle$$

规范势变换

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + i\vec{\nabla}_\lambda \theta[\lambda]$$

相因子不变

$$F(|n[\lambda]\rangle) = F(|n[\lambda]\rangle')$$

量子绝热近似方法

本征方程 $H[\lambda] = E_n(\lambda)|n(\lambda)\rangle$

对应 $|n(\lambda)\rangle$ 的Berry几何相位

$$\gamma_n = i \int \langle n | \dot{n} \rangle dt = i \int \langle n | \nabla | n \rangle \cdot d\vec{\lambda}$$

对应于变换

$$|n[\lambda]\rangle \rightarrow |n(\lambda)\rangle' = e^{i\theta(\lambda)} |n(\lambda)\rangle$$

$|n(\lambda)\rangle'$ 的Berry几何相位可以变为

$$\gamma_n' = i \int \langle n | \nabla | n \rangle' \cdot d\vec{\lambda} = i \int \langle n | \nabla | n \rangle \cdot d\vec{\lambda} - \int \nabla \theta(\lambda) \cdot d\vec{\lambda}$$

$$\langle n | \nabla | n \rangle + i \nabla \theta(\lambda) = 0 \text{ 有解, 给出 } \gamma_n' = 0$$

量子绝热近似方法

由 $\langle n | \nabla | n \rangle + i \nabla \theta(\lambda) = 0$ 解得

$$\theta(\lambda) = -i \int \langle n | \nabla | n \rangle \cdot d\vec{\lambda}$$

因此 $\theta(\lambda)$ 依赖于参数空间的路径，它不是一个函数

$$|n[\lambda]\rangle \rightarrow |n(\lambda)\rangle' = e^{i\theta(\lambda)} |n(\lambda)\rangle$$

单值函数 $\rightarrow$ 多值函数

只有 $\nabla \times \langle n | \nabla | n \rangle = 0$ 时， $\theta(\lambda)$ 才和路径无关

量子绝热近似方法

设 $F(\phi)$ 定义在圆域上, 即 $\phi \in (0, 2\pi)$

$F(\phi)$ 单值, $F(\phi) = F(\phi + 2\pi)$

$F(\phi) \neq F(\phi + 2\pi)$, $F(\phi)$ 转一圈不能回到初值,

$F(\phi)$ 不是单值函数

波恩-奥本海默近似

在量子绝热近似的讨论中，参数 $\lambda(t)$ 只是一个人为改变的含时参数，当 $\lambda(t) = R = (R_1, R_2, \dots, R_N)$ 是一个由动力学决定的参数时，量子绝热近似就是所谓的Born-Oppenheimer (BO) 近似。

两类自由度：快变自由度 x (电子坐标)，慢变自由度 R (核坐标)。

哈密顿量为

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(R) + H_s[R, x]$$

$$\text{其中 } p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial R}$$

波恩-奥本海默近似

固定 R ,求解

$$H_s[R, x]|n[R]\rangle = \varepsilon_n[R]|n[R]\rangle$$

由于 $|n[R]\rangle$ 的完备性, $|\Psi\rangle = \sum \phi_n(R)|n[R]\rangle$
是

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

的通解。把 $\phi_n(R)$ 当作固定 R 时对 $|\Psi\rangle$ 展开的系数:

$$|\Psi\rangle = \sum \phi_n |n\rangle$$

波恩-奥本海默近似

代入定态薛定谔方程有

$$\begin{aligned} p^2 \phi_n(R) |n[R]\rangle &= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial R^2} (\phi_n(R) |n[R]\rangle) \\ &= -\hbar^2 \partial_R [(\partial_R \phi_n) |n[R]\rangle + \phi_n \partial_R |n\rangle] \\ &= -\hbar^2 [\partial_R^2 \phi_n |n[R]\rangle + 2 \partial_R \phi_n \partial_R |n\rangle + \phi_n \partial_R^2 |n\rangle] \end{aligned}$$

用 $\langle m |$ 左乘之

$$\begin{aligned} &\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} [\partial_R^2 + 2 \langle m | \partial_R | m \rangle \partial_R + \langle m | \partial_R^2 | m \rangle] + \varepsilon_m(R) + V(R) \right\} \phi_m(R) \\ &= E \phi_m[R] + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{n \neq m} [2 \langle m | \partial_R | n \rangle \partial_R + \langle m | \partial_R^2 | n \rangle] \phi_n(R)}_{\text{non-diagonal-term}} \end{aligned}$$

波恩-奥本海默近似

若非对角项为0, 有

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} (\nabla - iA_m)^2 + V(R) + \varepsilon_m(R) \right] \phi_m(R) = E \phi_m(R)$$

$A_m = i\langle m | \partial_R | m \rangle$ 称为诱导规范场 (Induced Gauge 或人工规范场)

(1) 慢变自由度看上去像是经历了一个矢量势 A_m 和标量势

$$\phi_m(R) = \varepsilon_m(R) + V(R)$$

(2) 我们应用

$$A_m^2 = -\langle m | \partial_R | m \rangle \langle m | \partial_R | m \rangle$$

而

$$\begin{aligned} \langle m | \partial_R^2 | m \rangle &= \sum_n \langle m | \partial_R | n \rangle \langle n | \partial_R | m \rangle \\ &= -A_m^2 + \sum_{n \neq m} \langle m | \partial_R | n \rangle \langle n | \partial_R | m \rangle \end{aligned}$$

波恩-奥本海默近似

(2) 在上述推导中: $A_m^2 = -\langle m|\partial_R|m\rangle\langle m|\partial_R|m\rangle$

而

$$\begin{aligned}\langle m|\partial_R^2|m\rangle &= \sum_n \langle m|\partial_R|n\rangle\langle n|\partial_R|m\rangle \\ &= -A_m^2 + \sum_{n \neq m} \langle m|\partial_R|n\rangle\langle n|\partial_R|m\rangle\end{aligned}$$

其中已忽略非对角项。

$$\langle m|\partial_R|n\rangle = \frac{\langle m|\partial_R H_S|n\rangle}{E_n - E_m}, \quad m \neq n$$

本征函数为实数时,

$$\langle m|\partial_R|m\rangle = 0 \Rightarrow A_m = 0$$

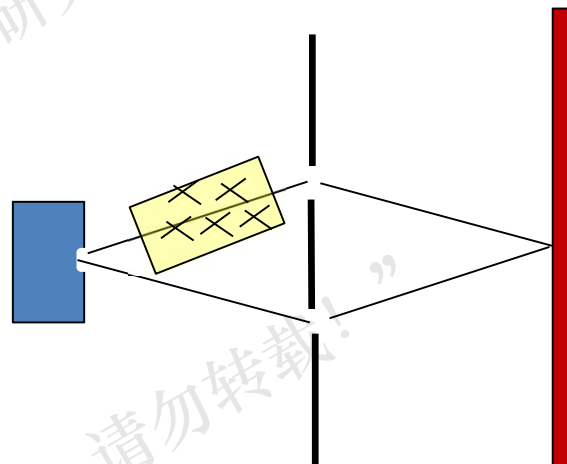
回到传统的BO近似, 有效哈密顿量为

$$H_{\text{eff}} = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 + V(R) + \varepsilon_n(R) \right]$$

诱导规范场的可观测效应：例子

假设中子分束后，一束通过自由空间，另一束经过一个非均匀的磁场区 $\vec{B}(z)$

$$\begin{cases} B_x = B \sin \theta \cos \frac{2\pi z}{L} \\ B_y = B \sin \theta \sin \frac{2\pi z}{L} \\ B_z = B \cos \theta \end{cases}$$



中子的运动方向沿 z 轴，哈密顿量为

$$H = \frac{p_z^2}{2m} + g\vec{B}(z) \cdot \vec{S} \equiv \frac{p_z^2}{2m} + H_s(z)$$

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} : \text{中子自旋算符。}$$

诱导规范场的可观测效应

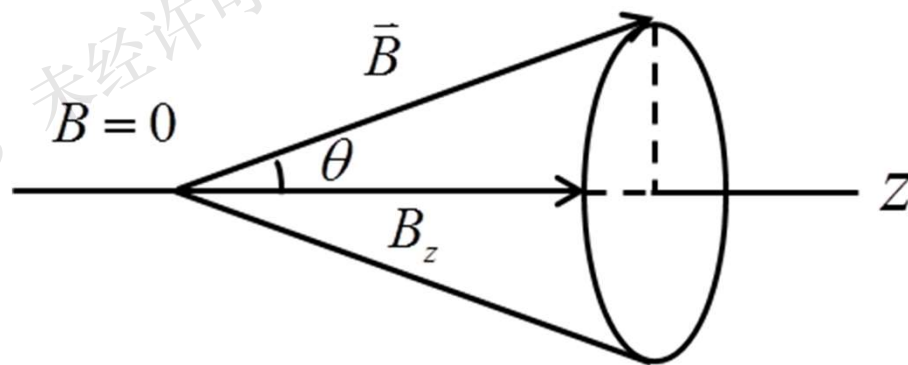
固定 z ， $H_s = H_s[B(z)]$ 的本征函数为

$$|n=1\rangle = |\uparrow(z)\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{-\frac{2\pi iz}{L}} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad |n=0\rangle = |\downarrow(z)\rangle = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} e^{-\frac{2\pi iz}{L}} \\ -\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

相应的本征值：

$$E_n = \pm gB$$

$$A_0 = i \left\langle 0 \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| 0 \right\rangle = \frac{2\pi}{L} \sin^2 \frac{\theta}{2} \vec{e}_z$$
$$A_1 = i \left\langle 1 \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| 1 \right\rangle = \frac{2\pi}{L} \cos^2 \frac{\theta}{2} \vec{e}_z$$



诱导规范场的可观测效应

当 θ 角固定，由于规范势局域地为常数，得运动方程

$$-\frac{\hbar^2}{2M} [\nabla - iA(n)]^2 \phi(n) = (E - E_n) \phi(n)$$

的解为 $\phi_k(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i \int_0^z A_n dz'} e^{ikz}$

其中 $\int_0^L A_n dz' = \sum_{j=1}^3 \oint_C \langle n | \partial_{B_j} | n \rangle dB_j \equiv \gamma_n$ 是Berry几何位相。

相应的本征值为

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \hbar\omega_0, E_1 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \hbar\omega_0$$

$$\gamma_0 = 2\pi \sin^2 \frac{\theta}{2} = 2\pi - \gamma_1 \text{ 恰是环路 } C \text{ 张成的立体角的一半。}$$

诱导规范场的可观测效应

开始处在 $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 上， T 时刻到达 L 外。

$$\begin{aligned}\Psi(T, L) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikz} \left[\sin \frac{\theta}{2} e^{-iE_0 T/\hbar} e^{i\gamma_0} |\downarrow(L)\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{-iE_1 T/\hbar} e^{i\gamma_1} |\uparrow(L)\rangle \right] \\ &= a(T) |\uparrow\rangle + b(T) |\downarrow\rangle\end{aligned}$$

中子沿 z 轴方向的极化率为

$$\begin{aligned}P_z &= |a(T)|^2 - |b(T)|^2 \\ &= 1 - 2\sin^2[\omega_0 T + \gamma_0] \sin^2 \theta\end{aligned}$$

这就是著名的Bitter-Dubbers实验结果(PRL59,251(1987))。他们在随中子相对运动的坐标系考虑这个问题，把实验结果解释为Berry相因子的效应。我们在实验室坐标系中分析这个问题，通过BO近似求解定态问题。这个实验可解释为诱导规范场的直接效应。

2.7 量子力学的费曼路径积分表述

为了深入理解量子演化算子 $U(t)$ 的物理意义，方便进行针对具体问题计算，我们介绍量子力学的另一种表述——费曼路径积分。路径积分表述有着直观的物理图像，在量子场论有直观的应用，特别是可以给出费曼图的解释证明。

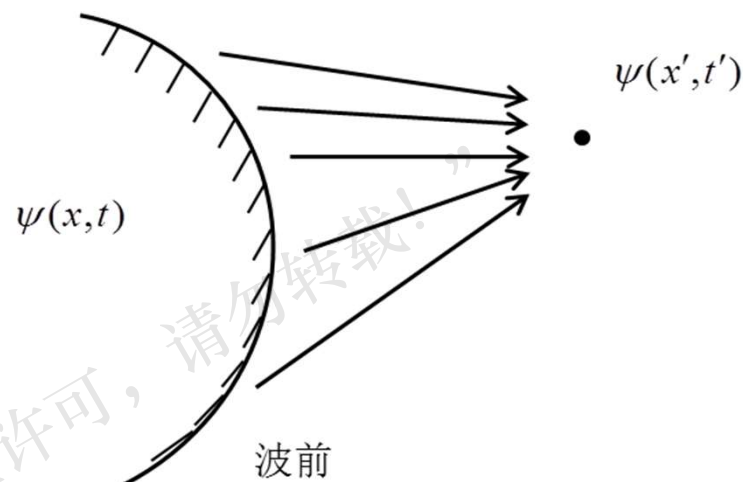
路径积分

设哈密顿量为 H 的量子系统从 $t = t_a$ 时状态 $|\Psi_a\rangle$ 演化到时刻

$t = t_b$, 波函数

$$\begin{aligned} |\Psi_b\rangle &= U(t_b, t_a) |\Psi_a\rangle \\ &= \int \langle x' | U(t_b, t_a) | \Psi_a \rangle | x' \rangle dx' \\ &= \iint dx dx' \langle x' | U(t_b, t_a) | x \rangle \Psi(x, t_a) | x' \rangle \end{aligned}$$

即 $\Psi(x', t_b) = \int K(x', t_b; x, t_a) \Psi(x, t_a) dx$



这非常像光学惠更斯原理： $t = t_b$ 时刻在 x' 的振幅由 $t = t_a$ 时刻在 x 点上振幅叠加而成

路径积分

取 $t_a = t$, 则 $t_b = t'$

$$K(x', t'; x, t) = \langle x' | U(t', t) | x \rangle = \left\langle x' \left| \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (t' - t) H \right\} \right| x \right\rangle$$

称为传播子，它是演化矩阵的坐标空间表示。

把时间 t 分成 N 份，令 $\tau = \frac{t' - t}{N}$ ，则

$$\begin{aligned} K(x', t'; x, t) &= \left\langle x_N \left| \prod_{j=N-1}^0 U(t_{j+1}, t_j) \right| x_0 \right\rangle \\ &= \left\langle x_N \left| \prod_{j=N-1}^0 \exp[-i\tau H] \right| x_0 \right\rangle = \left(\prod_{k=N-1}^0 \int_{-\infty}^{\infty} dx_k \right) \prod_{j=N-1}^0 K(x_{j+1}, x_j, \tau) \end{aligned}$$



路径积分

其中每一个因子

$$K(x_{j+1}, x_j, \tau) = K(x_{j+1}, t_{j+1}; x_j, t_j) = \langle x_{j+1} | \exp[-i\tau H] | x_j \rangle$$

当

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \equiv T + V$$

由于 τ 很小

$$\begin{aligned} K(x_{j+1}, x_j, \tau) &= \langle x_{j+1} | e^{-i\tau H} | x_j \rangle \\ &= \langle x_{j+1} | 1 - i\tau(T + V) | x_j \rangle \\ &\cong \langle x_{j+1} | (1 - i\tau T)(1 - i\tau V) | x_j \rangle \\ &= \langle x_{j+1} | (1 - i\tau T) | x_j \rangle (1 - i\tau V(x)) \\ &\cong \langle x_{j+1} | e^{-i\tau T} e^{-i\tau V(x)} | x_j \rangle \end{aligned}$$

路径积分

插入动量表示动量本征态完备性条件

$$\begin{aligned} K(x_{j+1}, x_j, \tau) &= \int dp \langle x_{j+1} | e^{-i\tau T} | p \rangle \langle p | e^{-i\tau V(x)} | x_j \rangle \\ &= \int \frac{dp_j}{2\pi} e^{ip_j(x_{j+1} - x_j) - i\tau \left[\frac{p_j^2}{2m} + V(x_j) \right]} = \int \frac{dp_j}{2\pi} e^{ip_j(x_{j+1} - x_j) - i\tau H(p_j, x_j)} \end{aligned}$$

于是我们得传播子的相空间表达

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{D[x]D[p]}{2\pi} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} [p_j(x_{j+1} - x_j) - \tau H(p_j, x_j)] \right\}$$

其中

$$D[x] = \prod_{j=1}^{N-1} dx_j, D[p] = \prod_{j=1}^{N-1} dp_j$$

路径积分

$N \rightarrow \infty$ 时

$$\begin{aligned}\sum_{j=0}^{N-1} [p_j(x_{j+1} - x_j)] &\rightarrow \int_{t_a}^{t_b} p(t) \dot{x}(t) dt \\ \sum \tau H(p_j, x_j) &\rightarrow \int_{t_a}^{t_b} H(p, x) dt\end{aligned}$$

于是有

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int_{x_a}^{x_b} \frac{D[x]D[p]}{2\pi} e^{-iS[p,x]}$$

$S(p, x)_{t_a}^{t_b} = \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L}(t) dt$ 称为相空间的作用量泛函

拉氏量 $\mathcal{L}(t) = p\dot{x} - H(p, x)$

位形空间的路径积分

在下式中把中把 p_j 积分掉。

$$K(x_{j+1}, x_j, \tau) = \int \frac{dp_j}{2\pi} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} p_j (x_{j+1} - x_j) - \tau \left(\frac{p_j^2}{2m} + V(x_j) \right) \right\}$$

利用积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2 \pm 2i\beta x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} e^{-\beta^2/\alpha^2} \quad \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\alpha p^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \exp[-(\alpha^2 k^2 + i\beta k + i\gamma k^2)] = \left(\frac{\pi}{\alpha^2 + i\gamma} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{\beta^2(\alpha^2 - i\gamma)}{4(\alpha^2 + \gamma^2)}}$$

于是

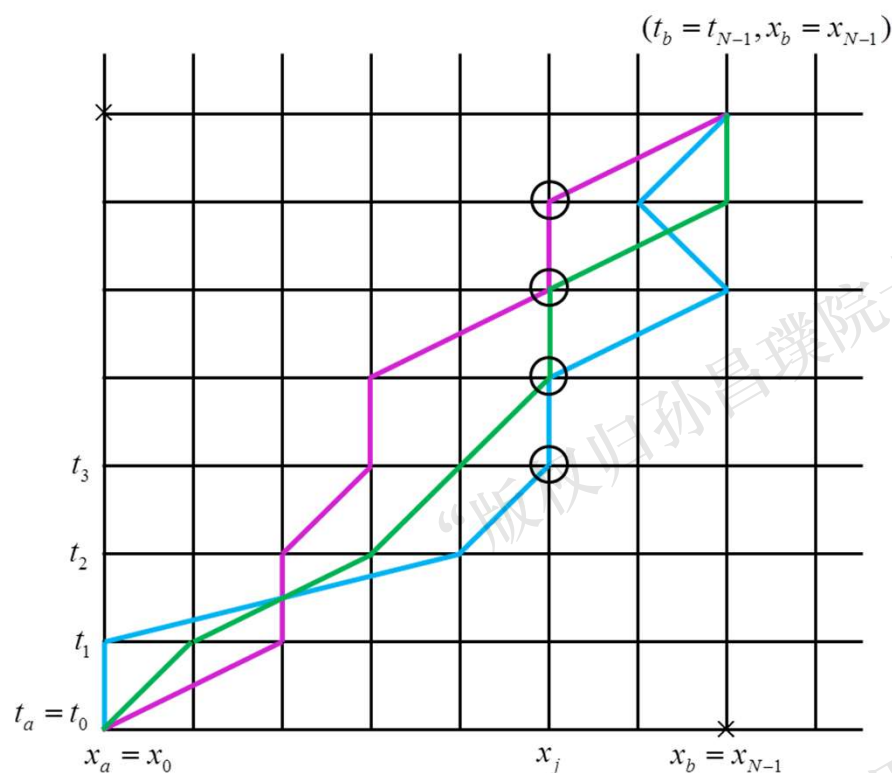
$$\begin{aligned} K_{ab} &= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ (\tau \rightarrow 0)}} \left(\frac{m}{2\pi i \tau} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_j e^{i\tau \left[\sum \frac{m}{2} (x_{j+1} - x_j)^2 / \tau^2 - iV(x_j) \right]} \\ &= N \int_{x_a}^{x_b} Dx(t) e^{iS[x(t)]}_b^a \end{aligned}$$

其中 $S[x(t)]_b^a \equiv i \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right] \equiv i \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L}(t) dt$ 是经典作用量。

位形空间的路径积分

从以上表达式可以看出，在 a - b 传播子的计算中，只须计算经典作用量，并把它们作为位相。加起来，可得到量子力学传播子。因此，量子力学的路径积分形式可以提供从量子到经典过渡的物理图像

路径积分的物理意义



如图所示，联接 (t_0, x_0) 和 (t_{N-1}, x_{N-1}) 所有的路径遍布所有点 (t_j, x_j) ，在直线 $x = x_j$ 上，对 $t_1, t_2, \dots, t_N$ 点值的加和相当于对 t 的积分，而在水平线 $t = t_j$ ，对 $x_1, x_2, \dots, x_N$ 点作用是相因子的加和相当于对 x 的积分。

二重积分 $\int dx_j \int dt$ 相当于对所有路径求和，每一个路径贡献

一个由作用量确定的相因子
$$K(a, b) = \sum_{x_a \rightarrow x_b} \text{const} \cdot e^{\frac{iS(t, x(t))}{\hbar}}$$

位形空间的路径积分

例子：一维自由粒子的路径积分

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$$

相应的传播子是

$$K(a, b) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ (\tau \rightarrow 0)}} \left(\frac{m}{2\pi i \tau} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_j e^{\frac{i\tau}{\hbar} \sum_0^{N-1} \frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\tau} \right)^2}$$

利用高斯积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{i\pi}{\alpha}} \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 e^{i\alpha[(x_2 - x_1)^2 + (x_1 - x_0)^2]} = \sqrt{\frac{i\pi}{\alpha}} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\alpha}{2}(x_2 - x_0)^2}$$

因此

$$\int dx_1 dx_2 \cdots dx_{N-1} e^{i\alpha[(x_N - x_{N-1})^2 + \cdots + (x_2 - x_1)^2 + (x_1 - x_0)^2]} = \left(\frac{i\pi}{\alpha} \right)^{\frac{N-1}{2}} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\frac{\alpha}{N}(x_N - x_0)^2}$$

位形空间的路径积分

给出传播子的表达式

$$K(a, b) = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ (\tau \rightarrow 0)}} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{\frac{N}{2}} \left(\frac{i\pi}{\alpha} \right)^{\frac{N-1}{2}} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\alpha(x_b - x_a)^2} = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)} \right)^{\frac{1}{2}} e^{i \frac{(x_b - x_a)^2}{2\hbar(t_b - t_a)}}$$

$$\left(\alpha = \frac{m}{2\pi \hbar \tau} \right)$$

由运动方程 $m\ddot{x} = 0$ ，得 $\dot{x}_{cl} = v = \text{constant}$ 粒子运动的经典轨迹：

$$x_{cl}(t) = x_a + \frac{x_b - x_a}{t_b - t_a} (t - t_a)$$

经典作用量

$$S_{cl}(t) = i \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{1}{2} m \dot{x}_{cl}^2 = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} m \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}$$

位形空间的路径积分

传播子可以表达为作用量的相因子

$$K(a, b) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} S_{cl}}$$

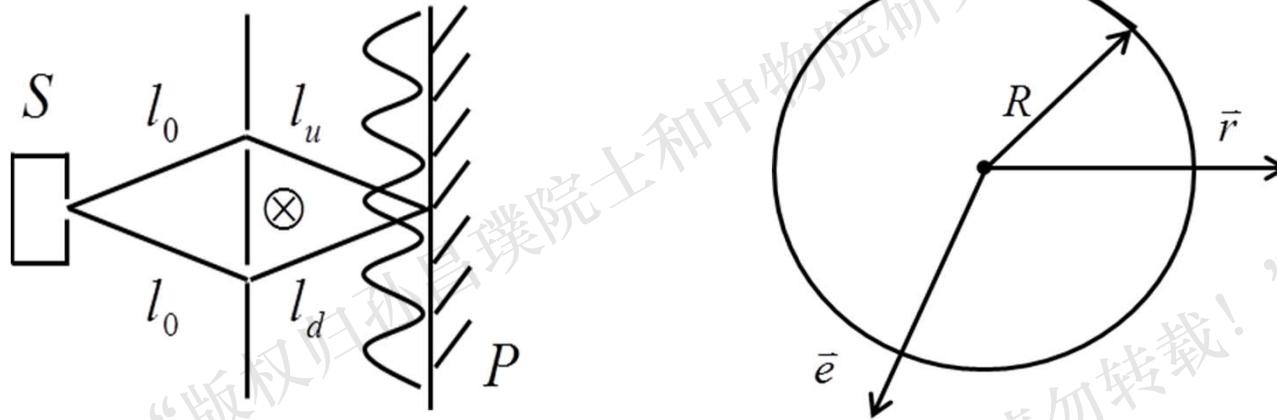
在一般的势场 V 中，在半经典近似下，可以证明（侯伯元等，路径积分与量子物理引导，P103-105）传播子可以表达为经典轨道的形式

$$K(a, b) = \xi e^{\frac{i}{\hbar} S_c(x_b, t_b; x_a, t_a)}$$

其中 $S_c(x_b, t_b; x_a, t_a)$ 是定义在两个时空点 (x_a, t_a) 和 (x_b, t_b) 间的经典作用量。

路径积分应用—Aharonov-Bohm效应

考察如下图的理想实验



从源 S 发射出的电子经双缝在屏 P 上发生干涉，有一个理想的细长螺线管，垂直于纸面放置，有一个完全屏蔽在螺线管内磁场 B ，其外完全无磁场。在自由空间区域，体系的拉格朗日为

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + e \dot{x} \cdot \vec{A}$$

路径积分应用—Aharonov-Bohm效应

在一定的规范下写出螺线管内外的电磁势

$$\vec{A} = \begin{cases} \frac{1}{2} B r \hat{n} & r < R \\ \frac{1}{2} B \frac{R^2}{r} \hat{n} & r > R \end{cases}$$

磁场

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = \begin{cases} B \vec{e} & r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

在内部是一个常数，在外部完全为零。根据经典电磁学，由于电子和外部磁场之间完全没有相互作用，螺线管中的磁场不会影响电子的运动，然而，在量子力学中，它可以影响电子的干涉。

路径积分应用—Aharonov-Bohm效应

根据路径积分的观点，传播子主要由两个经典路径 $u = l_0 + l_u$ 和 $u = l_0 + l_d$ 上的作用量决定。它们分别为

$$F_\alpha = e^{i \int_\alpha (\frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 + e \vec{A} \cdot \frac{d\vec{x}}{dt}) dt} = \exp \left[i \frac{2\pi}{\lambda} (l_0 + l_\alpha) + ie \int_\alpha \vec{A} \cdot d\vec{x} \right] \equiv e^{i\Phi_\alpha}$$

两条路径相位差为

$$\Delta\Psi = \Psi_u - \Psi_d = 2\pi \frac{l_d - l_u}{\lambda} + ie \left(\int_d - \int_u \right) \vec{A} \cdot d\vec{x} = 2\pi \frac{l_d - l_u}{\lambda} + ie \oint \vec{A} \cdot d\vec{x}$$

其中

$$\oint \nabla \times \vec{A} \cdot d\vec{S} = \int \vec{B} \cdot d\vec{S} = B\pi R^2 = \Phi$$

路径积分应用—Aharonov-Bohm效应

在上述计算中我们应用了

$$\begin{aligned}\int_{t_1}^{t_2} \frac{1}{2} m \dot{x}^2 dt &= \frac{1}{2} m \int_{x_a}^{x_b} v dx = \frac{1}{2} m v (x_b - x_a) \\ &= \frac{1}{2} m \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a} = \frac{1}{2} p (x_b - x_a) = \frac{2\pi l_0}{\lambda} + \frac{2\pi l_1}{\lambda}\end{aligned}$$

其中 $\lambda = \frac{2\pi}{p} \cong \frac{2\pi(t_b - t_a)}{m(l_0 + l_1)}$ 是电子的物质波波长。

路径积分应用—Aharonov-Bohm效应

由于在双缝开启时的波函数为两个路径积分相因子相干叠加

$$K \propto e^{\frac{i}{\hbar}S_u} + e^{\frac{i}{\hbar}S_d}$$

$$\psi = \psi_0 K$$

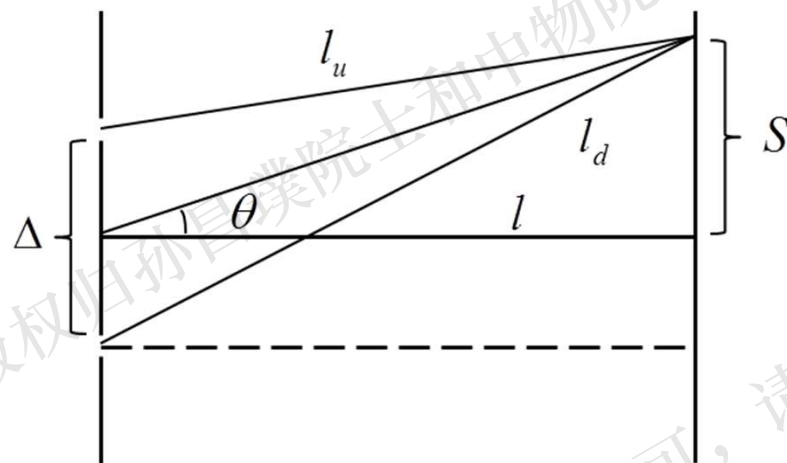
于是屏上的电子分布强度为

$$I(\theta) = 4\pi I_0 \cos^2 \left(\frac{\pi\delta}{\lambda} \sin\theta + \frac{e}{2} \phi \right) \quad I_0 = |\psi_0|^2$$

这种干涉强度依赖于磁通量的效应，称为Aharonov-Bohm (A-B) 效应。

路径积分应用—Aharonov-Bohm效应

在计算路径差，用到以下的几何分析



当 $l \gg S$ 时，可以近似地算出

$$l_d = \sqrt{l^2 + \left(s + \frac{\Delta}{2}\right)^2} \simeq \sqrt{l^2 + s^2} + \frac{s\Delta}{2\sqrt{l^2 + s^2}} \quad l_u = \sqrt{l^2 + s^2} - \frac{\Delta}{2} \sin\theta$$
$$\simeq \sqrt{l^2 + s^2} + \frac{\Delta}{2} \sin\theta$$

AB效应与不可积相位因子

以上讨论表明，电磁势A是有物理效应的。A给出电磁场的描述是冗余的（over-description）。而

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

给出的电磁场描述是不充分的（under-description）。只有不可积相因子

$$\exp(i \int \vec{A} \cdot d\vec{l})$$

才能给出恰如其分的描述，这导致人们对规范场的深入理解

第二章补充材料

Berry 相因子的几何意义

“版权归易璞院士和中物院研究生院所有”
“寇享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载”

BERRY相因子的几何意义

自旋1/2粒子在磁场 $\vec{B} = (B_1, B_2, B_3)$ 中的哈密顿量

$$H[\vec{B}] = -\mu \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

$|\vec{B}| = \sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}$ 大小给定时, 参数空间 $\{\vec{B} \mid |\vec{B}| = B\}$

定义了 R^3 中的一个二维球面, 这是一个流形(Manifold)。由于我们不能整体地引进 S^2 坐标, 我们说 S^2 是拓扑非平凡的。

选择球坐标描述

$$\vec{B}: \begin{cases} B_x = B \sin \theta \cos \varphi \\ B_y = B \sin \theta \sin \varphi \\ B_z = B \cos \theta \end{cases}$$

BERRY相因子的几何意义

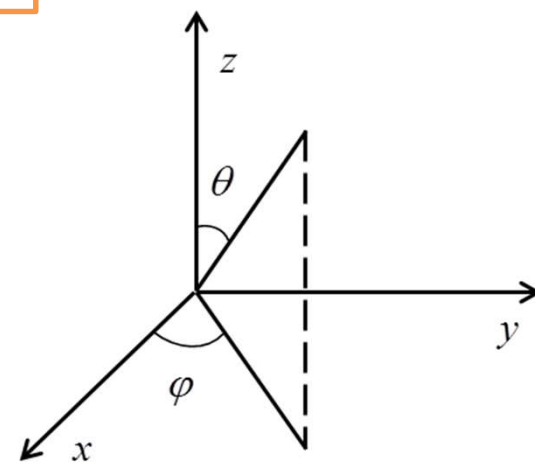
S^2 的南极 $S = (0,0,-1)$ 对应于 $\theta = \pi$ 这时， φ 可以取任意值；同样在北极 $\theta = 0$ 也有同样的不确定性问题。为此，我们必须用两个坐标邻域来确定性描述单位球面 S^2 它们是 S^2 的两个开集

$$U_S = S^2 \setminus S = \{(\theta, \varphi) | 0 \leq \theta < \pi\}$$

$$U_N = S^2 \setminus N = \{(\theta, \varphi) | 0 < \theta \leq \pi\}$$

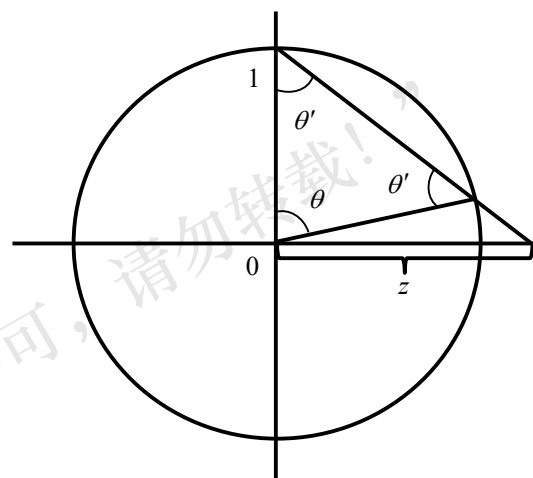
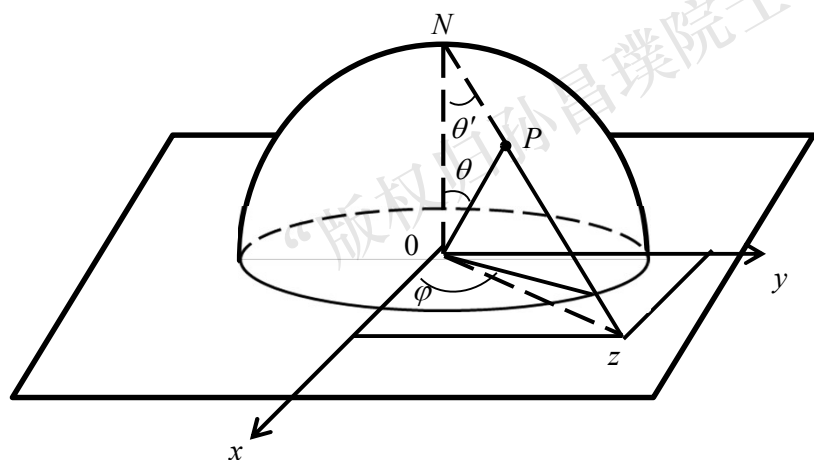
分别对应于扣掉南极和北极的球，

$$S^2 = U_S \cup U_N$$



BERRY相因子的几何意义

现在我们可以定义在 U_S 上的 S^2 的一个局域坐标，它是不完整球面 U_S 上的点 $P = (\theta, \varphi)$ 到二维复平面上的点的一一对应。



$$\theta' = \frac{1}{2}(180^\circ - \theta) = 90^\circ - \frac{\theta}{2}$$

$$|z| = |OZ| = \tan \theta' = \cot \frac{\theta}{2}$$

$$z = \cot \frac{\theta}{2} \cos \varphi + i \cot \frac{\theta}{2} \sin \varphi = \cot \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \\ = U_S^1 + i U_S^2$$

BERRY相因子的几何意义

同理，我们定义南极球 U_N 上的局域坐标

$$W = \tan \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} = U_N^1 + iU_N^2$$

在 U_S 和 U_N 的交集区 $U_S \cap U_N = \{(\theta, \varphi) | 0 < \theta < \pi\}$ 上

$$z = \frac{1}{|W|^2} W$$

两套坐标间的变换为

$$(U_S^1, U_S^2) = \left(\frac{U_N^1}{(U_N^1)^2 + (U_N^2)^2}, \frac{U_N^2}{(U_N^1)^2 + (U_N^2)^2} \right)$$

显然，变换函数 $U_S^1 = f^1(U_N^1, U_N^2)$ 和 $U_S^2 = f^2(U_N^1, U_N^2)$

无穷可微，因此我们说 S^2 构成了一个微分流形。

BERRY相因子的几何意义

一般说来，如果一个“位形”空间 M 不能用一个整体的坐标（同构于 R^N 来描述，我们说 M 是拓扑非平凡的。但是，我们可以用多个可以同构于 R^N 的开子集来覆盖它。若这些坐标之间的变换函数是无穷可微的，则称 M 是一个微分流形。而定义于上的矢量场 $v: x \rightarrow v(x) (x \in M)$ 满足一定的条件，则构成一个纤维丛。

BERRY相因子的几何意义

在我们的例子中， $H[\vec{B}]$ 的本征函数 $|\psi_{\pm}(\vec{B})\rangle$ 可看成一个纤维丛结构。

在 U_N 上，

$$|\psi_{+}(\vec{B})\rangle_N = \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{bmatrix}; |\psi_{-}(\vec{B})\rangle_N = \begin{bmatrix} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}$$

在 $\theta = 0$ 时， φ 的不确定性被排除掉。

在 U_S 上，

$$|\psi_{+}(\vec{B})\rangle_S = \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}; |\psi_{-}(\vec{B})\rangle_S = \begin{bmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{bmatrix}$$

在 $\theta = \pi$ 时， φ 的不确定性被排除掉。

BERRY相因子的几何意义

两者之间的变换关系为

$$G_{12} = \begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi} \end{pmatrix}$$

显然，任何一个状态

$$|\psi\rangle = a|\psi_+(B)\rangle_S + b|\psi_-(B)\rangle_S$$

$$|\psi'\rangle = a'|\psi_+(B)\rangle_N + b'|\psi_-(B)\rangle_N$$

则

$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = G_{12} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

BERRY相因子的几何意义

在球上平移一个矢量 $\vec{e}(t)$ ，有两个要求：

① $\vec{e}(t)$ 必须和其切点的径向矢量 $\vec{r}(t)$ 始终保持垂直，即

$$\frac{d}{dt} [\vec{e}(t) \cdot \vec{r}(t)] = 0$$

② 保证 $\vec{e}$ 和 $\vec{r}$ 的坐标系不扭曲

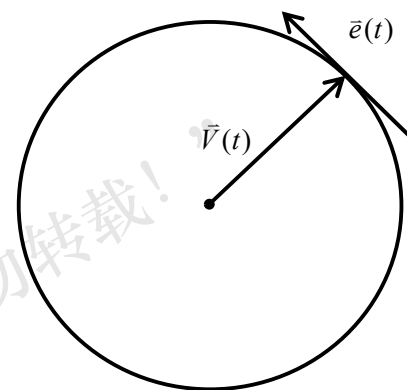
$$\vec{r} \cdot \vec{\Omega} = 0$$

第二个条件自动满足，因为 $\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = \vec{b} \cdot (\vec{c} \times \vec{a}) = \vec{c} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})$

$$\vec{r} \cdot \vec{\Omega} = \vec{r} \cdot (\vec{r} \times \dot{\vec{r}}) = \dot{\vec{r}} \cdot (\vec{r} \times \vec{r}) = 0$$

可以证明，当 $\dot{\vec{e}} = \vec{\Omega} \times \vec{e}$

$$\frac{d}{dt} [\vec{r} \cdot \vec{e}] = 0$$



BERRY相因子的几何意义

证明:

利用 $(a \times b) \times c = (a \cdot c)b - (b \cdot c)a$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}[\vec{r} \cdot \vec{e}] &= \dot{\vec{r}} \cdot \vec{e} + \vec{r} \cdot \dot{\vec{e}} \\&= \dot{\vec{r}} \cdot \vec{e} + \vec{r} \cdot (\vec{\Omega} \times \vec{e}) \\&= \dot{\vec{r}} \cdot \vec{e} + \vec{r} \cdot (\vec{r} \times \dot{\vec{r}}) \times \vec{e} \\&= \dot{\vec{r}} \cdot \vec{e} + \vec{r} \cdot [(\vec{r} \cdot \vec{e}) \dot{\vec{r}} - (\vec{r} \cdot \dot{\vec{r}}) \vec{r}] \\&= \dot{\vec{r}} \cdot \vec{e} - \vec{r} \cdot [(\vec{r} \cdot \vec{e}) \vec{r}] \quad (\vec{r} \cdot \dot{\vec{r}} = 1) \\&= 0\end{aligned}$$

故 $\dot{\vec{e}} = \vec{\Omega} \times \vec{e}$ 可以
视为矢量 $\vec{e}$ 的平移条件

BERRY相因子的几何意义

定义复矢量 $\vec{\psi} = \vec{e} + i \vec{r} \times \vec{e} \quad \psi^* = \vec{e} - i \vec{r} \times \vec{e}$

则

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{\psi} &= \frac{d}{dt} \vec{e} + i \frac{d \vec{r}}{dt} \times \vec{e} + i \vec{r} \times \frac{d \vec{e}}{dt} \\ &= \vec{\Omega} \times \vec{e} + i \frac{d \vec{r}}{dt} \times \vec{e} + i \vec{r} \times (\vec{\Omega} \times \vec{e}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_m(\psi^*, \psi) &= -(\vec{\Omega} \times \vec{e}) \cdot (\vec{r} \times \vec{e}) + \vec{e} \cdot \left(\frac{d \vec{r}}{dt} \times \vec{e} \right) + \vec{e} \cdot \vec{r} \times (\vec{\Omega} \times \vec{e}) \\ &= -(\vec{\Omega} \times \vec{e}) \cdot (\vec{r} \times \vec{e}) + 0 + \vec{e} \cdot \left((\vec{r} \cdot \vec{e}) \vec{\Omega} - (\vec{r} \cdot \vec{\Omega}) \vec{e} \right) \times (\vec{\Omega} \times \vec{e}) \\ &= -(\vec{\Omega} \cdot \vec{r}) \cdot (\vec{e} \cdot \vec{e}) + (\vec{\Omega} \cdot \vec{e}) \cdot (\vec{e} \cdot \vec{r}) + \vec{e} \cdot \left((\vec{r} \cdot \vec{e}) \vec{\Omega} - (\vec{r} \cdot \vec{\Omega}) \vec{e} \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$(a \times b) \cdot (c \times d) = (a \cdot c)(b \cdot d) - (a \cdot d)(b \cdot c)$$

BERRY相因子的几何意义

因此对每个矢量 ψ 平行移动的条件为

$$I_m(\psi^*, \dot{\psi}) = 0$$

推广到量子力学，波函数的平移条件为

$$I_m \langle \psi | \frac{d\psi}{dt} \rangle = 0$$

假设波函数平移时只改变一个相因子

$$|\psi[\lambda]\rangle = W[\lambda] |n[\lambda]\rangle$$

且

$$H(\lambda) |n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |n(\lambda)\rangle \quad (E_n(\lambda) = 0)$$

BERRY相因子的几何意义

则

$$\frac{d}{dt} |\psi[\lambda]\rangle = \sum_{m \neq n} W[\lambda] \langle m | \frac{d}{dt} n \rangle |m[\lambda]\rangle + \left[\frac{dW}{dt} + W \langle n | \frac{d}{dt} n \rangle \right] |n[\lambda]\rangle$$

平行移动意味着

$$\text{Im} \left\langle n(\lambda) \left| \frac{d}{dt} \right| \psi(\lambda) \right\rangle = \frac{dW}{dt} + W \left\langle n \left| \frac{d}{dt} \right| n \right\rangle = 0$$

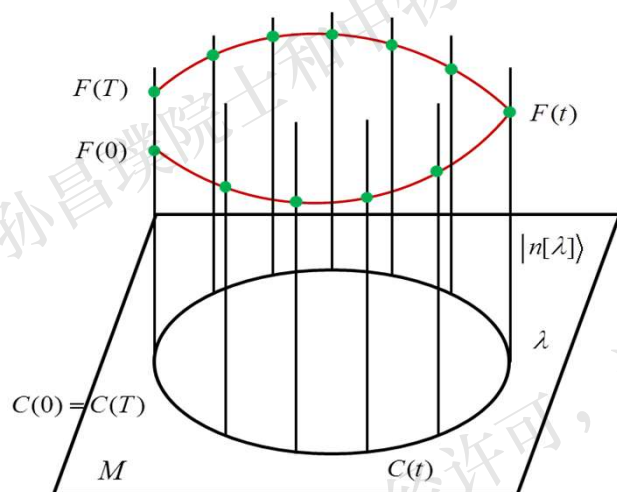
则

$$W = e^{i\gamma_n(\lambda)} \quad \left(\gamma_n(\lambda) = \int_0^\lambda \left\langle n \left| \frac{d}{d\lambda'} \right| n \right\rangle d\lambda' \right)$$

是Berry几何相因子。

BERRY相的纤维丛结构

参数空间形成一个流形 $M: \{\lambda = (\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_N)\}$ 非简并的本征函数可视为一个线丛： $|n[\lambda]\rangle$ 定义了线丛的一个



封闭曲线 $C(t)\{\lambda(t)|\lambda(0) = \lambda(T)\}$ 线丛上每一根纤维定义为
 $\{F = e^{i\theta} |n\rangle | \theta \in \mathbb{R}\}$ 封闭曲线 $C(t)$ 水平提升后 $F(t)$ 不再是封闭
曲线， $F(T) = e^{i\gamma_n(T)} F(0)$ 首尾相差一个几何相因子。