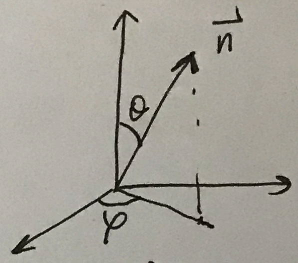
第十四讲

§自旋系统的路径积分

我们考虑个自旋量子数 $I=\frac{1}{2}$ 的粒子.（S 为作用量保留）.

$$|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}$$



其中 $|\alpha|^2+|\beta|^2=1$. 也可以写成

$$|\psi\rangle = e^{ib}\left(\cos\frac{\theta}{2}e^{-\frac{i\varphi}{2}}|\uparrow\rangle + e^{\frac{i\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle\right) = |b,\theta,\varphi\rangle$$

是 $\sigma_n=\vec{\sigma}\cdot\vec{n}$，$\vec{n}=(\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$ 的本征值为1的本征态. e^{ib} 是任意的相因子，或gauge变换自由度.

- 我们看到 $|b,\theta,\varphi\rangle$ 是完备的.（b 固定，对 θ,φ 积分）.

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\ |b,\theta,\varphi\rangle\langle b,\theta,\varphi| = |\uparrow\rangle\langle\uparrow|+|\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \mathbb{1}$$

- $\vec{I}=\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ 的期望值 记是 $\frac{\vec{n}\hbar}{2}$ 或 $\langle\vec{\sigma}\rangle=\vec{n}$）

$$\langle b,\theta,\varphi|\frac{\hbar\vec{\sigma}}{2}|b,\theta,\varphi\rangle = \frac{1}{2}\langle\vec{n}|\vec{\sigma}|\vec{n}\rangle = \frac{\vec{n}}{2} \quad (\text{取}\hbar=1).$$

- 但是不同的 $|b,\theta,\varphi\rangle$ 不正交.

$$\langle\vec{n}|\vec{n}'\rangle \neq \delta(\vec{n}-\vec{n}')$$

为了使用路径积分工具，有完备性就行. 这个表象称为自旋相干态表象.

- 可推广到任意 I：$(2I+1)\int\frac{d^2\vec{n}}{4\pi}|\vec{n}\rangle\langle\vec{n}| = \mathbb{1}$. $\left[\int d^2\vec{n} = \int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\right]$

$$\langle\vec{n}|\vec{S}|\vec{n}\rangle = I\vec{n}$$

我们来计算从$|\vec{n}\rangle$出发到$|\vec{n}'\rangle$的传播子 ($\hbar=1$)

$$\langle \vec{n}'| e^{-iHt'} |\vec{n}\rangle = \int \prod_{i=1}^{N-1} \frac{d\vec{n}_i}{2\pi} \langle \vec{n}'| e^{-i\Delta t H} |\vec{n}_{N-1}\rangle \langle \vec{n}_{N-1}| e^{-i\Delta t H} |\vec{n}_{N-2}\rangle \cdots$$

$$\cdots\cdots \times \langle \vec{n}_{k+1}| e^{-i\Delta t H} |\vec{n}_k\rangle \cdots\cdots \langle \vec{n}_1| e^{-i\Delta t H} |\vec{n}\rangle$$

初时刻为$t_0=0$，末时刻$t_N=t'$，$\frac{t'-t}{N}=\Delta t$. 以$I=\frac{1}{2}$粒子为例

$|\vec{n}_k\rangle$是t_k时刻的态矢，$t_k=k\cdot\Delta t$

引入简写 $|t\rangle = |\vec{n}(t)\rangle = |b(t), \theta(t), \varphi(t)\rangle$

① $\langle t+\Delta t| e^{-i\Delta t H} |t\rangle \simeq \langle t+\Delta t| (1-i\Delta t H) |t\rangle$

$= \langle t+\Delta t|t\rangle - i\Delta t \langle t+\Delta t|H|t\rangle$

由于 $|t+\Delta t\rangle = |t\rangle + \Delta t \frac{d|t\rangle}{dt}$ $\Leftarrow$ $d|t\rangle \equiv |t+\Delta t\rangle - |t\rangle$

简写 $= |t\rangle + \Delta t\, |\dot{t}\rangle$

$\therefore$ ① $= (\langle t| + \Delta t \langle \dot{t}|)\cdot|t\rangle - i\Delta t \langle t|H|t\rangle$ $\Leftarrow$ 略去Δt^2项

$= 1 + \Delta t [\langle \dot{t}|t\rangle - i\langle t|H|t\rangle]$

$= e^{-i\Delta t \langle t|H|t\rangle + \Delta t \langle \dot{t}|t\rangle}$

由于 $\langle t|t\rangle = 1 \Rightarrow \frac{d\langle t|t\rangle}{dt} = \langle \dot{t}|t\rangle + \langle t|\dot{t}\rangle = 0$

$= 2\mathrm{Re}\langle \dot{t}|t\rangle$

$\therefore \langle \dot{t}|t\rangle$ 是纯虚数 $= -\langle t|\dot{t}\rangle$

① $= e^{-i\Delta t \langle t|H|t\rangle + i\Delta t \cdot i\langle t|\dot{t}\rangle}$

$\Delta t \cdot i\langle t|\dot{t}\rangle$ 是相位，反映$|t\rangle$与$|t+\Delta t\rangle$的"连络"

以上得到的相位是与 Berry phase 相关的．我们来复习一下 Berry phase．

- 考虑一个固定磁场 $\vec{B}$，指向为 $\vec{n}$：$\vec{B}=-B\vec{n}$

一个自旋的 Hamiltonian：$H=-\vec{\mu}\cdot\vec{B}=-\frac{\hbar\omega}{2}\sigma_{\vec{n}}$

其中 $\vec{\mu}=-\mu_0\vec{\sigma}$ 是磁矩，$\sigma_{\vec{n}}=\vec{n}\cdot\vec{\sigma}$，$\frac{\hbar\omega}{2}\equiv\mu_0 B$

假设自旋处于 $\sigma_{\vec{n}}$ 的本征态 $|\vec{n}\rangle$：$\sigma_{\vec{n}}|\vec{n}\rangle=|\vec{n}\rangle$

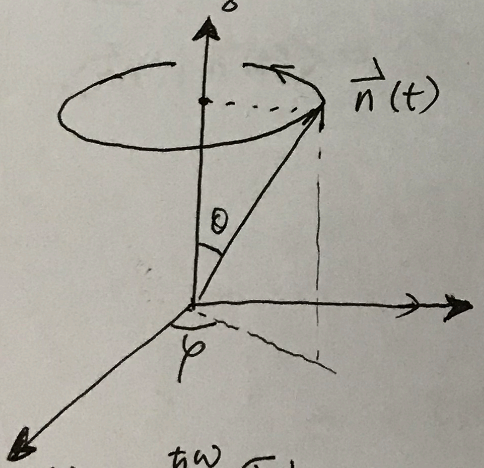
$$H|\vec{n}\rangle=-\frac{\hbar\omega}{2}|\vec{n}\rangle$$

经过时间 t'：

$$|t'\rangle=e^{-\frac{iHt'}{\hbar}}|\vec{n}\rangle=e^{\frac{i\omega}{2}t'}|\vec{n}\rangle$$

t' 时处于 $|\vec{n}\rangle$ 的几率幅：$\langle\vec{n}|e^{-\frac{iHt'}{\hbar}}|\vec{n}\rangle=e^{\frac{i\omega t'}{2}}$，$\frac{\omega t'}{2}$ 是动力学相位．

- 现在假设磁场 $\vec{B}$ 绕 z 轴无限缓慢地转动：$\vec{B}=-B\vec{n}(t)$



根据绝热定理，系统每时每刻都处于当时的本征态 $|\vec{n}(t')\rangle$：

$$|t'\rangle=|\vec{n}(t')\rangle e^{i\theta(t')+i\gamma(t')}$$

$$\theta(t')=\frac{-1}{\hbar}\int_0^{t'}dt\,E(t)=\frac{\omega t'}{2}$$

$$H(t)=-\frac{\hbar\omega}{2}\sigma_{\vec{n}(t)}$$

$$H(t)|\vec{n}(t)\rangle=-\frac{\hbar\omega}{2}|\vec{n}(t)\rangle$$

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

总相位：$\theta(t')$ 是动力学相位，$\gamma(t')$ 就是前面提到的相位的积分

当磁场绕z轴转完一圈（设耗时 T）： $\vec{B}(T)=\vec{B}(0)$

$|T\rangle$ 应该回到 $\vec{B}(0)$ 的本征态，当然会多出相因子

$$|T\rangle = |\vec{n}(0)\rangle\, e^{\frac{i\omega T}{2} + i\int_0^T dt\; i\langle \vec{n}(t)|\dot{\vec{n}}(t)\rangle}$$

$|t\rangle$ 从 $|t=0\rangle$ 到 $|t=T\rangle$ 形成了一条绝热路径，我们可以

算出其对应的作用量

$$\langle \vec{n}(0)|T\rangle = \langle \vec{n}(0)|\, e^{-i\int_0^T H(t)dt}\, |\vec{n}(0)\rangle = e^{iS}$$

相邻：$\langle \vec{n}(t+\Delta t)|\, e^{-iH(t)\Delta t}\, |\vec{n}(t)\rangle = e^{i\frac{\omega}{2}\Delta t + i^2\Delta t\, \langle \vec{n}(t)|\dot{\vec{n}}(t)\rangle}$

$|\vec{n}(t)\rangle$ 是 $H(t)$ 的本征态，本征值不变 $\frac{\hbar\omega}{2}$

所以：$S = \frac{\omega T}{2} + \gamma(T)$ ， $\gamma(T) = i\int_0^T \langle \vec{n}(t)|\dot{\vec{n}}(t)\rangle\, dt$

- 我们来具体计算一下 $\gamma(T)$：

注意 $|\vec{n}(t)\rangle$ 是 $\vec{B}(t)$ 决定的，可写为 $|\vec{n}(\vec{B}(t))\rangle$

$$\langle \vec{n}(t)|\dot{\vec{n}}(t)\rangle = \frac{\langle \vec{n}(t)|\cdot\left(|\vec{n}(t+\Delta t)\rangle - |\vec{n}(t)\rangle\right)}{\Delta t}$$

$$= \frac{\langle \vec{n}(\vec{B})|\cdot\left(|\vec{n}(\vec{B}+\Delta\vec{B})\rangle - |\vec{n}(\vec{B})\rangle\right)}{\Delta t}$$

$$= \langle \vec{n}(\vec{B})|\cdot \frac{\left(|\vec{n}(\vec{B}+\Delta\vec{B})\rangle - |\vec{n}(\vec{B})\rangle\right)}{\Delta\vec{B}} \cdot \frac{\Delta\vec{B}}{\Delta t}$$

其中 $|\vec{n}(\vec{B}+\Delta\vec{B})\rangle - |\vec{n}(\vec{B})\rangle = \left[C_1(\vec{B}+\Delta\vec{B}) - C_1(\vec{B})\right]|+\rangle + \left[C_2(\vec{B}+\Delta\vec{B}) - C_2(\vec{B})\right]|-\rangle$

$$= \left(\nabla_{\vec{B}} C_1(\vec{B})\cdot\Delta\vec{B}\right)|+\rangle + \left(\nabla_{\vec{B}} C_2(\vec{B})\cdot\Delta\vec{B}\right)|-\rangle$$

$$= \left[\nabla_{\vec{B}} C_1(\vec{B})\,|+\rangle + \nabla_{\vec{B}} C_2(\vec{B})\,|-\rangle\right]\cdot \Delta\vec{B}$$

$$\equiv |\nabla_{\vec{B}}\,\vec{n}(\vec{B})\rangle \cdot \Delta\vec{B} \qquad \left(\text{或}\ \frac{|\vec{n}(\vec{B}+\Delta\vec{B})\rangle - |\vec{n}(\vec{B})\rangle}{\Delta\vec{B}}\cdot\Delta\vec{B}\right)$$

因此 $\gamma(T) = \oint d\vec{B}\cdot i\langle\vec{n}(\vec{B})|\nabla_{\vec{B}}\,\vec{n}(\vec{B})\rangle$ ①.

这里 $\langle\vec{n}(\vec{B})|\nabla_{\vec{B}}\,\vec{n}(\vec{B})\rangle$ 是一个矢量.

利用 $|\vec{n}(\vec{B})\rangle = \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix} \equiv \zeta(\vec{B})$ ← 旋量波函数
θ,φ 由 $\vec{B}(t)$ 决定

$$|\nabla_{\vec{B}}\,\vec{n}(\vec{B})\rangle = \frac{\partial}{\partial B}\zeta(\vec{B})\,\hat{B} + \frac{1}{B}\frac{\partial}{\partial\theta}\zeta(\vec{B})\,\hat{\theta} + \frac{1}{B\sin\theta}\frac{\partial\zeta(\vec{B})}{\partial\varphi}\hat{\varphi}$$

$$= \frac{1}{B}\begin{pmatrix}-\frac{1}{2}\sin\frac{\theta}{2}\\ -\frac{1}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}\hat{\theta} + \frac{1}{B\sin\theta}\begin{pmatrix}0\\ i\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}\hat{\varphi}$$

$$\langle\vec{n}(\vec{B})|\nabla_{\vec{B}}\,\vec{n}(\vec{B})\rangle = \zeta^{+}\nabla_{B}\zeta = \frac{i\sin^2\frac{\theta}{2}}{B\sin\theta}\hat{\varphi}$$ (注: 实际上我们是求的 $\nabla_{\vec{B}}$)

由于转动中 θ 不变, $\therefore\ \gamma(T) = i\oint \frac{i\sin^2\frac{\theta}{2}}{B\sin\theta}(B\sin\theta\, d\varphi) = \pi(\cos\theta - 1)$

$$= -\frac{\Omega}{2}$$ ← $\vec{B}(t)$ 包围的立体角 Ω

我们还可以利用 $\oint d\vec{l}\cdot\vec{A} = \int_{S}(\nabla\times\vec{A})\cdot d\vec{S}$

计算 Berry 曲率: $\nabla_{\vec{B}}\times i\langle\vec{n}(\vec{B})|\nabla_{B}\,\vec{n}(\vec{B})\rangle$

$$= \frac{i}{B\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\,\frac{i\sin^2\frac{\theta}{2}}{B\sin\theta}\right)\hat{B} = -\frac{\hat{B}}{2B^2}$$

同样求出 $\gamma(T) = \int_{S}\frac{-\hat{B}\cdot d\vec{S}}{2B^2} = -\frac{\Omega}{2}$.

$\therefore\ \gamma(T)$ 又称几何相位, 当 H 的参数形成封闭回路时出现