第十六讲

我们回到传播子的计算．特别有用的是虚时情形

$\langle \vec n| e^{-\beta H}|\vec n\rangle$．这是因为热平衡系综

$$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H} = \sum_\alpha \langle\alpha|e^{-\beta H}|\alpha\rangle \qquad \left(\int d^2\vec n = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\right)$$

$$= \sum_\alpha \int \langle\alpha|\vec n\rangle\langle \vec n|e^{-\beta H}|\alpha\rangle \frac{d^2\vec n}{4\pi}(2I+1) \qquad (S=\tfrac{1}{2} \text{ 等价 } 2I+1=2)$$

$$= (2I+1)\int \frac{d\vec n}{4\pi}\langle\vec n|e^{-\beta H}|\vec n\rangle$$

任意物理量 A 的统计平均

$$[A] = \mathrm{Tr}[\rho A] = \frac{1}{Z}\frac{(2I+1)}{4\pi}\int d\vec n\, \langle\vec n|e^{-\beta H}A|\vec n\rangle$$

可最终由配分函数找出．下面以 $I=\frac{1}{2}$ 为例计算

$$\langle\vec n|e^{-\beta H}|\vec n\rangle = \int\prod_{i=1}^{N-1}\frac{d\vec n_i}{2\pi}\langle\vec n|e^{-\Delta\tau H}|\vec n_{N-1}\rangle\langle\vec n_{N-1}|e^{-\Delta\tau H}|\vec n_{N-2}\rangle\times$$

$$\cdots\times\langle\vec n_{k+1}|e^{-\Delta\tau H}|\vec n_k\rangle\langle\vec n_k|\cdots\langle\vec n_1|e^{-\Delta\tau H}|\vec n\rangle$$

这里 $\tau_0=0$，$\tau_N=\beta$，$\Delta\tau=\frac{\beta}{N}$，简写 $|\tau\rangle = |\vec n(\tau)\rangle$

$$\tau_k = k\Delta\tau \to \tau$$

之前我们计算过 $\langle t+\Delta t|e^{-i\Delta t H}|t\rangle$ （实时）．

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

其中 $\langle t|\dot t\rangle = \langle t|\frac{d}{dt}|t\rangle$ 为纯虚数．所以 $i\langle t|\dot t\rangle$ 为实数

利用 $it\to\tau$，$i\Delta t\to\Delta\tau$

$$\Rightarrow \langle\tau+\Delta\tau|e^{-\Delta\tau H}|\tau\rangle = e^{-\Delta\tau[\langle\tau|H|\tau\rangle + \langle\tau|\dot\tau\rangle]}$$

注意这里 $|\dot{\tau}\rangle = \frac{d}{d\tau}|\tau\rangle$

$$\frac{d}{d\tau}\langle\tau|\tau\rangle = 0 \Rightarrow \langle\dot{\tau}|\tau\rangle + \langle\tau|\dot{\tau}\rangle = 2\,\mathrm{Re}\langle\tau|\dot{\tau}\rangle = 0$$

即 $\langle\tau|\dot{\tau}\rangle$ 仍是纯虚数. $-\Delta\tau\langle\tau|\dot{\tau}\rangle = i\Delta\tau\ i\langle\tau|\dot{\tau}\rangle$

<u>$i\Delta\tau\langle\tau|\dot{\tau}\rangle$ 仍然给出一个相位 (phase)</u>.

再来看 $\langle\tau|H|\tau\rangle$.

我们研究的是一个自旋. 通常考虑它在外磁场中的势能

$$H = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -\frac{\hbar\omega}{2}\sigma_z \quad \leftarrow \text{取磁场方向为 } z \text{ 轴}, \ \vec{\mu} = \mu_0\vec{\sigma}$$

更一般的形式: $H = -\mu_0\vec{B}\cdot\vec{\sigma}$

利用 $\langle\vec{n}|\vec{\sigma}|\vec{n}\rangle = \vec{n}$, $\Rightarrow \langle\tau|H|\tau\rangle = -\mu_0\vec{B}\cdot\vec{n}$ ← 经典的.

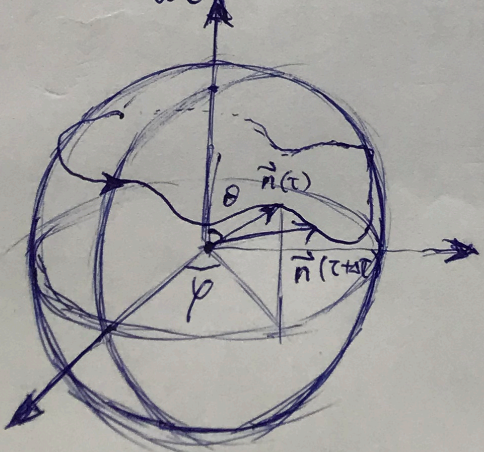
$$\therefore \langle\tau+\Delta\tau|e^{-\Delta\tau H}|\tau\rangle = e^{-\Delta\tau H(\vec{\sigma}\to\vec{n}(\tau)) + i(i\Delta\tau\langle\tau|\dot{\tau}\rangle)}$$

先来计算 $\langle\tau|\dot{\tau}\rangle$.

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

b 是任意的相位. 可以随 τ 变化.

$$\frac{d|\tau\rangle}{d\tau} = i\dot{b}|\tau\rangle + e^{ib}\left[\left(-\frac{i\dot{\varphi}}{2}\cos\frac{\theta}{2} - \frac{\dot{\theta}}{2}\sin\frac{\theta}{2}\right)e^{-\frac{i\varphi}{2}}|\uparrow\rangle + \left(\frac{i\dot{\varphi}}{2}\sin\frac{\theta}{2} + \frac{\dot{\theta}}{2}\cos\frac{\theta}{2}\right)e^{\frac{i\varphi}{2}}|\downarrow\rangle\right]$$



$\theta(\tau)$, $\varphi(\tau)$ 描述了 $\vec{n}$ 的路径.

☆ $\vec{n}(\beta) = \vec{n}(0)$ 这是一条封闭路径! Berry phase well defined

$|\vec{n}(\beta)\rangle$ 与 $|\vec{n}(0)\rangle$ 只能差 $n\cdot 2\pi$!

$$\langle\tau|\dot\tau\rangle = i\dot b + \cos\frac{\theta}{2}\left(-\frac{i\dot\varphi}{2}\cos\frac{\theta}{2} - \frac{\dot\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\right) + \sin\frac{\theta}{2}\left(\frac{i\dot\varphi}{2}\sin\frac{\theta}{2} + \frac{\dot\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\right)$$

$$= i(\dot b - \frac{\dot\varphi}{2}\cos\theta)$$

封闭路径要求 $|\vec n(\beta)\rangle = |\vec n(0)\rangle e^{in\cdot 2\pi}$

∴我们可选 $b^{(\tau)} = \frac{\varphi(\tau)}{2}$ （其实记之 $|\vec n(\tau)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle$）

（或者 $b^{(\tau)} = -\frac{\varphi(\tau)}{2}$ $\rightarrow$ $|n(\tau)\rangle = e^{-i\varphi}\cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle$）

$\langle\vec n(\beta)|e^{-\beta H}|\vec n(0)\rangle = \int \mathcal{D}\vec n(\tau)\, e^{-S}$，← $-S$中包含 $i\gamma$，γ为Berry phase.

$$S = +\int_0^\beta d\tau \langle\tau|\dot\tau\rangle + \int_0^\beta H(\vec n(\tau))\, d\tau$$

$$= i\int_0^\beta (\dot b - \frac{\dot\varphi}{2}\cos\theta)\, d\tau + \int_0^\beta H(\vec n(\tau))\, d\tau$$

$$= \frac{i}{2}\oint (1-\cos\theta)\, d\varphi + \int_0^\beta H(\vec n(\tau))\, d\tau$$

$$\downarrow$$

$\frac{i}{2}\iint_0^\theta \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \frac{i\Omega}{2}$ ← 路径张开的立体角 ∴Berry phase $= -\frac{\Omega}{2}$

- 如果我们选 $b^{(\tau)} = -\frac{\varphi(\tau)}{2}$，则 Berry phase $= -(\frac{\Omega}{2} - 2\pi)$，也没关系.
- 以上计算可推广到任意自旋 I（不限于 $I=\frac{1}{2}$）.

利用 $\langle\vec n|\vec S|\vec n\rangle = I\vec n$，$(2I+1)\int\frac{d\vec n}{4\pi}|\vec n\rangle\langle\vec n| = \mathbb{1}$

$S = iI\Omega + \int_0^\beta H(I\vec n)\, d\tau$ $\longrightarrow$ Berry phase $= -I\Omega$

可以看到不同选择 b，造成 Ω 相差 4π. 但只要 I 是 $\frac{1}{2}$ 的整数倍，e^{-S} 不变.

这反过来说明 自旋只能取 $\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots\cdots$

（你还可以怎样选 b？）

也可以理解为立体角以 4π 为模.

③