对于自旋传播子，特别有用的是虚时情形 $\langle\vec{n}|e^{-\beta H}|\vec{n}\rangle$

因为热平衡系综

$$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H} = \sum_{\alpha} \langle\alpha| e^{-\beta H} |\alpha\rangle$$

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

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

$\langle\vec{n}|e^{-\beta H}|\vec{n}\rangle$: $t=0$时刻 $|\vec{n}\rangle$ $t=-i\beta\hbar$ 时刻回到 $|\vec{n}\rangle$ 的几率幅

以 $S=\frac{1}{2}$ 为例计算，将 β 分成 N 分，$\Delta\tau = \beta\hbar/N$

$$\langle\vec{n}|e^{-\beta H}|\vec{n}\rangle = \int \prod_{k=1}^{N-1} \frac{d^2 n_k}{2\pi} \langle\vec{n}(\tau_N)| e^{-\Delta\tau H} |\vec{n}(\tau_{N-1})\rangle\langle\vec{n}(\tau_{N-1})$$

$$\cdots \langle\vec{n}(\tau_{k+1})| e^{-\Delta\tau H} |\vec{n}(\tau_k)\rangle \cdots\cdots \langle\vec{n}(\tau_1)|e^{-\Delta\tau H}|\vec{n}(\tau_0)\rangle$$

注意：$|\vec{n}(\tau_N)\rangle = |\vec{n}(\tau_0)\rangle = |\vec{n}\rangle$，$\tau_k \to \tau$，$\tau_{k+1} = \tau+\Delta\tau$

类似于 $\langle\vec{n}(t+\Delta t)| e^{-i\Delta t H} |\vec{n}(t)\rangle = e^{-i\Delta t H(\vec{n}(t)) + i\Delta t \langle\vec{n}(t)|\dot{\vec{n}}(t)\rangle}$

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

(注意 $|\dot{\vec{n}}(\tau)\rangle = \frac{d|\vec{n}(\tau)\rangle}{d\tau}$，若 $i\Delta t = \Delta\tau$，则 $|\dot{\vec{n}}(\tau)\rangle = -i|\dot{\vec{n}}(t)\rangle$)

☆ $\langle\vec{n}(\tau)|\dot{\vec{n}}(\tau)\rangle$ 是纯虚数，与 $\langle\vec{n}(t)|\dot{\vec{n}}(t)\rangle$ 一样

最终:

$$\langle \vec{n} | e^{-\beta H} | \vec{n} \rangle = \int \mathcal{D}\vec{n}(\tau)\ e^{-S/(\hbar)}$$

其中 $S = \int_0^{\beta(\hbar)} d\tau \left[H(\vec{S} \to S\vec{n}(\tau)) + \hbar \langle \vec{n}(\tau) | \dot{\vec{n}}(\tau) \rangle \right]$

通常 $\int_0^{\beta} i\langle \vec{n}(\tau) | \dot{\vec{n}}(\tau) \rangle d\tau$ 称为 Berry phase. $(-1 = i \cdot i)$

$i\langle n | \dot{n} \rangle$ 为实数.

2023 version

前面我们导出了 时间演化传播子

$$\langle \vec{n}(t') | e^{-i\frac{H t'}{\hbar}} | \vec{n}(0) \rangle = \int \mathcal{D}\vec{n}(t)\ e^{i\frac{S}{\hbar}}$$

其中 $S = \int_0^{t'} dt \left[i\hbar \langle \vec{n}(t) | \dot{\vec{n}}(t) \rangle - H(S\vec{n}(t)) \right]$

"虚"时演化

$$\langle \vec{n} | e^{-\beta H} | \vec{n} \rangle = \int \mathcal{D}\vec{n}(\tau)\ e^{-S/\hbar},$$ (也可利用Wick转动得到)

其中 $S = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\hbar \langle \vec{n}(\tau) | \dot{\vec{n}}(\tau) \rangle + H(S\vec{n}(\tau)) \right]$

$e^{iS/\hbar}$ 与 $e^{-S/\hbar}$ 中 有一样的相位 $\longrightarrow$ Berry phase

$+\int_0^{t'} dt\, i\langle \vec{n}(t) | \dot{\vec{n}}(t) \rangle$ 或 $+\int_0^{\beta\hbar} d\tau\, i\langle \vec{n}(\tau) | \dot{\vec{n}}(\tau) \rangle$

第十八讲（2022修订）

绝热定理. $H(t)|\psi_n^{(t)}\rangle = E_n^{(t)}|\psi_n^{(t)}\rangle$，缓慢变化.

$t=0$, $|t=0\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle$, $|t\rangle = |\psi_n^{(t)}\rangle e^{i\theta_n(t)+i\gamma_n(t)}$

其中 $\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n^{(t')}dt'$ → 动力学相位.

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

$= i\int_{R_i}^{R_f} \langle\psi_n^{(R)}|\nabla_R \psi_n^{(R)}\rangle \cdot d\vec{R}$

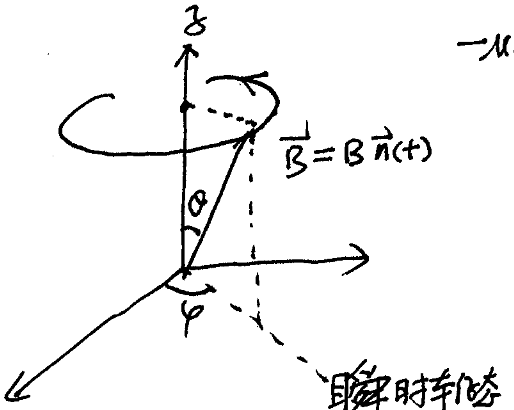
$H(t) = H(x, R(t))$
x 是 $\vec{p}, \vec{x}, \vec{S}$ 等动力学量,
$R(t)$ 是参数，比如外磁场
外电场，势阱宽度等

对比定态：$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$

$t=0$, $|t=0\rangle = |\psi_n\rangle$，则 $|t\rangle = |\psi_n\rangle e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$

相位$(-\frac{E_n t}{\hbar})$ 对应 $\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n dt' = -\frac{E_n t}{\hbar}$

例子：缓慢旋转磁场中的带电粒子的自旋演化.



$-\mu_0\vec{\sigma}\cdot\vec{B} = H(t) = -\frac{\hbar\omega}{2}\sigma_{\vec{n}(t)}$，本征态 $|\vec{n}(t)\rangle$ 与 $|-\vec{n}(t)\rangle$

$\vec{B}$ 以周期 $T \gg \frac{2\pi}{\omega}$ 绕z轴旋转，θ固定
$\omega \ll \omega$, $T\to\infty$.

$t=0$ 时，$|t=0\rangle = |\vec{n}(0)\rangle$，$H(0)$ 的 $\frac{\hbar\omega}{2}$ 本征态

$t=T$ 时，$|T\rangle = |\vec{n}(T)\rangle e^{\frac{i\omega T}{2}+i\gamma_n(T)}$

$\gamma_n(T) = i\int_0^T dt \langle\vec{n}(t)|\dot{\vec{n}}(t)\rangle$

注意：$|\vec{n}(T)\rangle = |\vec{n}(0)\rangle$，
（同一個 B 的同一個本征矢）

有：$\langle\vec{n}(0)|T\rangle = \langle\vec{n}(0)|e^{-i\int_0^T H(t)dt}|\vec{n}(0)\rangle = e^{\frac{i\omega T}{2}+i\gamma_n(T)}$

附加相位 $= \frac{\omega T}{2} + \gamma_n(T)$

路径积分 → $= \int \mathcal{D}\vec{m}(t)\, e^{\frac{iS}{\hbar}}$

其中：$S = \int_0^T dt\,[\,i\langle\vec{m}(t)|\dot{\vec{m}}(t)\rangle - H(I\vec{m}(t))]$

$H(t) = -\mu_0\vec{\sigma}\cdot\vec{B} \longrightarrow H(I\vec{m}) = -\mu_0 I\vec{m}\cdot B\vec{n}(t) = -\frac{\hbar\omega}{2}(\vec{m}\cdot\vec{n})$

由于初态是本征态 ⇒ 只有绝热路径有贡献. $\vec{m}(t) \to \vec{n}(t)$

讨论：~~第十五讲~~（2022修订）

• Berry phase 只对 <u>封闭路径</u> 有意义 (well defined)

对于瞬时本征态：$|\vec{n}\rangle$ 可以随意选任意相位，对应物理态不变，（gauge 自由）

$$|\vec{n}(t)\rangle \to |\vec{n}(t)\rangle e^{i\phi(t)} = |\tilde{\vec{n}}(t)\rangle$$ 也称规范变换

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

$$\gamma'(t') = i\int_0^{t'} dt \langle \tilde{\vec{n}}(t)|\dot{\tilde{\vec{n}}}(t)\rangle = \gamma(t') + \phi(0) - \phi(t')$$

不同的相位选取，得到不同的 $\gamma(t')$！

$\because |\vec{n}(t+\Delta t)\rangle = |\vec{n}(t)\rangle + \Delta t\, |\dot{\vec{n}}(t)\rangle$

能不能消去 $\gamma(t')$？

由于 $|\vec{n}(t)\rangle$ 与 $|\vec{n}(t+\Delta t)\rangle$ 几乎"平行"（Δt 内变化不大）.

$\therefore \left|\langle \vec{n}(t)|\vec{n}(t+\Delta t)\rangle\right| \approx 1$，$\langle n(t)|n(t+\Delta t)\rangle \approx e^{i\Delta\phi}$ → 称 common phase

每一小步，如果我们选取一个规范，使得 $\Delta\phi = 0$，那么 比如：（令 $\phi(t+\Delta t) - \phi(t) = -\Delta\phi$）

$$\gamma(t') \to \tilde{\gamma}(t') = i\int_0^{t'} dt\, \frac{\langle \tilde{n}(t)|\tilde{n}(t+\Delta t)\rangle - \langle \tilde{n}(t)|\tilde{n}(t)\rangle}{\Delta t} = 0$$

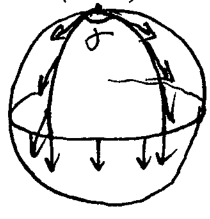
• Berry phase 消失了！← 通过定义 "common phase".

<u>然而对于封闭路径</u> → $|\vec{n}(T)\rangle$ 与 $|\vec{n}(0)\rangle$ 表示同一个瞬时本征态，~~自旋状态~~. 当我们选取变换 $|\vec{n}(t)\rangle \to |\vec{n}(t)\rangle e^{i\phi(t)}$ 后，

时 $|\vec{n}(0)\rangle \to |\vec{n}(0)\rangle e^{i\phi(0)}$ 与 $|\vec{n}(T)\rangle \to |\vec{n}(T)\rangle e^{i\phi(T)}$

必须满足 $e^{i\phi(0)} = e^{i\phi(T)}$，← 同一个物理态不能有两个相因子，$\therefore \phi(T) = \phi(0) + n\cdot 2\pi$，$n$ 整数！

$\gamma(T)$ 不可消去！



类似于在球面上"平行"移动一个矢量

• 反之，我们如果坚持使用 $|\tilde{n}(t)\rangle = e^{i\phi(t)}|n(t)\rangle$，

保证每一步都"平行"：$\langle\tilde{n}(t)|\tilde{n}(t+\Delta t)\rangle = 1$，

$\Rightarrow \gamma(T) = 0$，但是代价是：$|\tilde{n}(T)\rangle = e^{i\phi(T)}|n(T)\rangle$

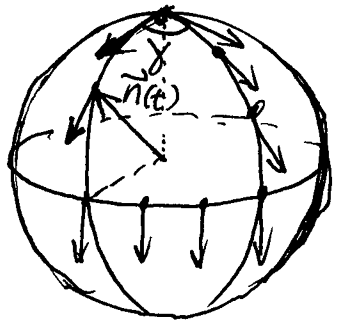
并且：$\gamma(T) + \phi(0) - \phi(T) = 0$，通常取 $\phi(0)=0$，则：

$\phi(T) = \gamma(T)$. 即：同一参数下本征态取了

不同的相位，相位差$\boxed{\text{正好是}}$ Berry phase

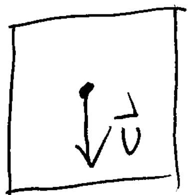
因此在封闭路径上对所有态都选取 common phase，保持平行是不可能的.

例：$\vec{v}(\vec{n}(t))$ 保持"平行".



投影在切平面上

始终方向不变



回到北极后发现角度改变了 $\gamma = \Omega$，

Ω 是路径张开的立体角.

• $\gamma(T) = \oint i\langle n(\vec{R})|\nabla_R n(\vec{R})\rangle \cdot d\vec{R}$

$\because \langle n(t)|\frac{\partial}{\partial t} n(t)\rangle dt = \langle n(\vec{R})|\nabla_R|n(\vec{R})\rangle \cdot d\vec{R}$

只与路径有关，与花费时间无关，故称几何相位.

定义 Berry connection $\vec{A} = i\langle n(\vec{R})|\nabla_R|n(\vec{R})\rangle$

$\gamma(T) = \oint \vec{A}\cdot d\vec{R} = \int_S (\nabla\times\vec{A})\cdot d\vec{S}$

定义 $\vec{F} = \nabla\times\vec{A}$ 为 Berry 曲率.

下面计算 $\gamma_n(T)$. 绝热旋转磁场，经过 $t=T$，磁场回到初始方向.

注意 $|\vec{n}(t)\rangle$ 由 $\vec{B}(t)$ 决定，可改写为 $|\vec{n}(\vec{B})\rangle$

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

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

其中：

$$|\vec{n}(\vec{B}+\Delta\vec{B})\rangle - |\vec{n}(\vec{B})\rangle = [C_1(\vec{B}+\Delta\vec{B}) - C_1(\vec{B})]|\uparrow\rangle + [C_2(\vec{B}+\Delta\vec{B}) - C_2(\vec{B})]|\downarrow\rangle$$

$$= (\nabla_{\vec{B}} C_1(\vec{B})\cdot\Delta\vec{B})\,|\uparrow\rangle + (\nabla_{\vec{B}} C_2(\vec{B})\cdot\Delta\vec{B})\,|\downarrow\rangle$$

$$= (\nabla_{\vec{B}} C_1(\vec{B})\,|\uparrow\rangle + \nabla_{\vec{B}} C_2(\vec{B})\,|\downarrow\rangle)\cdot\Delta\vec{B}$$

$$\equiv |\nabla_{\vec{B}}\,\vec{n}(\vec{B})\rangle\cdot\Delta\vec{B}$$

因此：$\gamma_n(T) = i\oint d\vec{B}\cdot\langle\vec{n}(\vec{B})|\nabla_{\vec{B}}\,\vec{n}(\vec{B})\rangle$，一圈 $t=T$.

保证 $|\vec{n}(0)\rangle = |\vec{n}(T)\rangle$

注意 $\langle\vec{n}(\vec{B})|\nabla_{\vec{B}}\,\vec{n}(\vec{B})\rangle$ 是个矢量，与 $d\vec{B}$ 点乘.

利用 $|\vec{n}(\vec{B})\rangle = \underbrace{\cos\frac{\theta}{2}}_{C_1}|\uparrow\rangle + \underbrace{\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}}_{C_2}|\downarrow\rangle$ （已给定规范选择）

$$= \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix} \equiv \xi(\vec{B}) \longleftarrow \text{旋量波函数}$$

另一个规范：$|\vec{n}(\vec{B})\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\cdot e^{-i\varphi}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle$

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

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

$$\langle\vec{n}(\vec{B})|\nabla_{\vec{B}}\,\vec{n}(\vec{B})\rangle = \xi^{+}\nabla_{\vec{B}}\xi = \frac{i\sin^2\frac{\theta}{2}}{B\sin\theta}\hat{\varphi} \longrightarrow \frac{-i\cos^2\frac{\theta}{2}}{B\sin\theta}$$

$\vec{B}$ 转动中 θ 不变：$d\vec{B} = (B\sin\theta\,d\varphi)\hat{\varphi}$

$$\gamma_n(T) = i\oint\frac{i\sin^2\frac{\theta}{2}}{B\sin\theta}\cdot B\sin\theta\,d\varphi = \pi(\cos\theta - 1) = -\frac{\Omega}{2}$$

$$\longrightarrow \pi(1+\cos\theta) = 2\pi - \frac{\Omega}{2}$$

即 $\vec{B}(t)$ 包围的立体角 $\Omega\times S$

还可以利用定理: $\oint d\vec{B}\cdot\vec{A} = \int_S (\nabla\times\vec{A})\cdot d\vec{S}$, $d\vec{B}=(B\sin\theta\, d\varphi)\hat{\varphi}$

• 定义 Berry 曲率: $\vec{F} = \nabla_B \times \boxed{i\langle \vec{n}(\vec{B})|\nabla_B \vec{n}(\vec{B})\rangle}$ → 规范矢势

$\vec{F}$ 类比 $\vec{B}$, 磁场, 规范不变

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

同样得到: $\gamma_n(T) = \int_{S'} \frac{-\hat{B}}{2B^2}\cdot d\vec{S} = -\frac{\Omega}{2}$

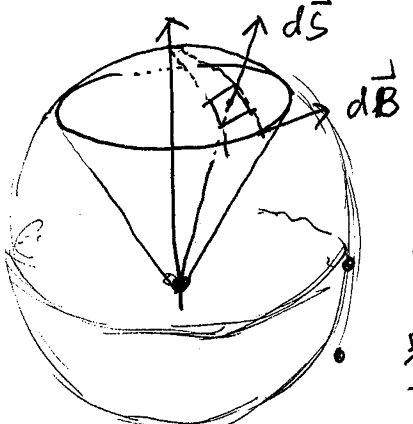
☆ 与规范选取无关(不变)

当 $|n'(\vec{B})\rangle = e^{i\phi(\vec{B})}|n(\vec{B})\rangle$

$\vec{A}' = \vec{A} - \nabla_B \phi(\vec{B})$

但是 $\vec{F}' = \vec{F}$

规范场!! $\vec{F}\to\vec{B}$



$d\vec{S} = (B^2\sin\theta\, d\theta\, d\varphi)\,\hat{B}(\theta,\varphi)$

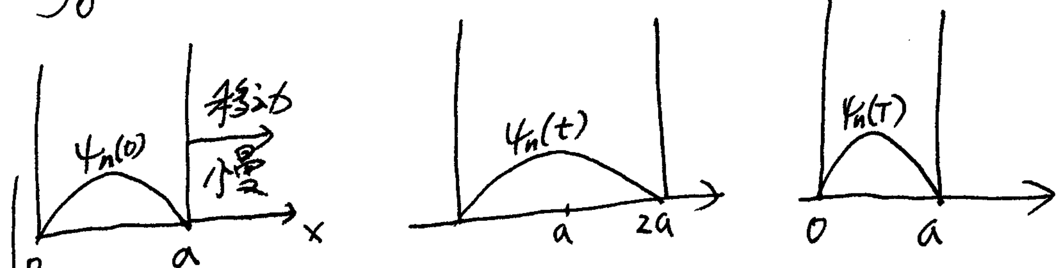
由于 γ_n 只由 Ω 决定, 所以只有几何相位只在 H 的参数形成封闭回路时有意义.

• 路径积分中任意封闭路径都有几何相位.

$i\int_0^\beta d\tau\, \langle\tau|\dot{\tau}\rangle = -S\Omega$, S 为自旋量子数.

选择"上"或"下"球面, $\Omega\to 4\pi-\Omega$, 同时 $\hat{B}$ 与 $d\vec{S}$ 反向, 因此: $\gamma=-S\Omega$ $\to \gamma'=S(4\pi-\Omega)$

物理上不应该有区别: $e^{i\gamma}=e^{i\gamma'} \Rightarrow 2S$ 为整数.



参数空间一维, 没有 Berry phase

• Chern number (陈数)

$$\int_{S^2}\vec{F}\cdot d\vec{S} = 2\pi\cdot C,\quad C\in\mathbb{Z}$$

• $\vec{F}$ 视为磁单极子, S 为磁荷, $2S\in\mathbb{Z}$ 对应磁荷量子化

球坐标系下旋度公式:

$$\nabla\times\vec{f} = \frac{1}{r\sin\theta}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\, f_\varphi) - \frac{\partial f_\theta}{\partial\varphi}\right]\hat{r} + \frac{1}{r}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial f_r}{\partial\varphi} - \frac{\partial}{\partial r}(r f_\varphi)\right]\hat{\theta} + \frac{1}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r}(r f_\theta) - \frac{\partial f_r}{\partial\theta}\right]$$