前面讲到绝热定理. $H(\vec{R}(t))$，参数 $\vec{R}$ 随 t 慢变.

$H(\vec{R}(t))\,|\psi_n^{(t)}\rangle = E_n^{(t)}\,|\psi_n^{(t)}\rangle$，$|\psi_n^{(t)}\rangle$ 为第 n 个瞬时本征态

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

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

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

$$= \int_{\vec{R}(0)}^{\vec{R}(t)} i\langle\psi_n(\vec{R})|\nabla_R\,\psi_n(\vec{R})\rangle\cdot d\vec{R}$$

这里 $\underline{|\psi_n(\vec{R})\rangle = |\psi_n^{(t)}\rangle}$，$\vec{R}=\vec{R}(t)$

瞬时本征态的相位可任意选定. $|\tilde{\psi}_n^{(t)}\rangle = |\psi_n^{(t)}\rangle e^{i\phi(t)}$

那么 $\tilde{\gamma}_n(t) = \gamma_n(t) + \phi(0) - \phi(t)$，因此不是 well defined.

但是当 $\vec{R}(t)=\vec{R}(0)$，即路径闭合，必须 $|\tilde{\psi}_n(\vec{R}(0))\rangle = |\tilde{\psi}_n(\vec{R}(t))\rangle e^{in\cdot 2\pi}$

即 $\phi(t) = \phi(0) + n\cdot 2\pi$. $n\in Z$ $(t\to T)$

$\Rightarrow \tilde{\gamma}_n(T) = \gamma_n(T) - n\cdot 2\pi$，这就是 well defined Berry phase

也可以这么看：选择适当的 $\phi(t)$ 保证

$\langle\tilde{\psi}_n(\vec{R}(t))|\tilde{\psi}_n(\vec{R}(t+\Delta t))\rangle = 1$，即保持"平行"

这样
$$\tilde{\gamma}_n(T) = \int_{\vec{R}(0)}^{\vec{R}(T)} i\,\frac{\langle\tilde{\psi}_n(\vec{R}(t))|\tilde{\psi}_n(\vec{R}(t+\Delta t))\rangle - \langle\tilde{\psi}_n(\vec{R}(t))|\tilde{\psi}_n(\vec{R}(t))\rangle}{\Delta\vec{R}}\cdot d\vec{R}$$

$= 0$ (一般不满足 $|\tilde{\psi}_n(\vec{R}(T))\rangle = |\tilde{\psi}_n(\vec{R}(0))\rangle$)

但是：$\phi(T) - \phi(0) = \gamma_n(T)$

正好是 Berry phase!

• $\gamma_n(T) = \oint i\langle\psi_n(\vec{R})|\nabla_R\,\psi_n(\vec{R})\rangle\cdot d\vec{R}$ 只有路径有关，也称几何相位

与花费时间无关（足够慢）

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

则 $\gamma_n = \oint \vec{A}\cdot d\vec{R}$

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

$\gamma_n = \int_S (\nabla\times\vec{A})\cdot d\vec{S} = \int_S \vec{F}\cdot d\vec{S}$ ← 磁通

当 $|\psi_n(\vec{R})\rangle \longrightarrow |\tilde{\psi}_n(\vec{R})\rangle = e^{i\phi(\vec{R})}|\psi_n(\vec{R})\rangle$，有

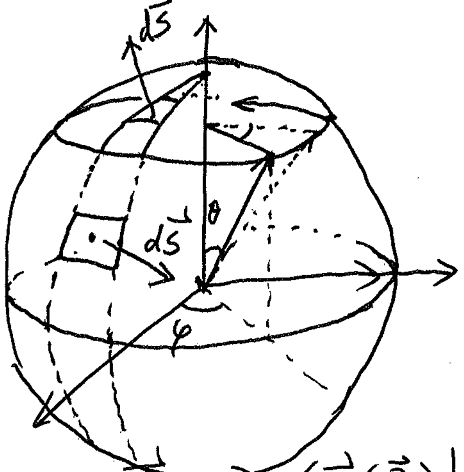
$\vec{A}\to\tilde{\vec{A}} = \vec{A} - \nabla_R\phi(\vec{R})$,

$\vec{F}\to\tilde{\vec{F}} = \vec{F}$

是规范变换！

$\vec{A}$ 类比矢势, $\vec{F}$ 类比磁场 $\vec{B}$

例子. 旋转磁场 $\vec{B}(t) = B\vec{n}(t) \longrightarrow \vec{R}(t)$.



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

本征值为 $-\frac{\hbar\omega}{2}$ 的瞬时本征态 $|\vec{n}(t)\rangle$

要求 $|\vec{n}(0)\rangle = |\vec{n}(T)\rangle$，因此可选

$|\vec{n}(\vec{B}(t))\rangle = \cos\frac{\theta(t)}{2}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta(t)}{2}e^{i\varphi(t)}|\downarrow\rangle$

$\vec{A} = i\langle \vec{n}(\vec{B})|\nabla_B|\vec{n}(\vec{B})\rangle = \frac{-\sin^2\frac{\theta(t)}{2}}{B\sin\theta(t)}\hat{\varphi}$

$d\vec{R}\to d\vec{B} = (B\sin\theta\, d\varphi)\hat{\varphi}$

$\gamma = -\frac{\Omega}{2}$

选择满足 $|\tilde{\vec{n}}(0)\rangle = |\tilde{\vec{n}}(T)\rangle$ 的瞬时本征态

$|\tilde{\vec{n}}(\vec{B}(t))\rangle = |\vec{n}(\vec{B}(t))\rangle e^{-i\varphi(t)} = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle$

则 $\tilde{\vec{A}} = \frac{-i\cdot i\cos^2\frac{\theta(t)}{2}}{B\sin\theta(t)}\hat{\varphi} \Longrightarrow \tilde{\gamma} = 2\pi - \frac{\Omega}{2}$ 等价于 γ.

$\because e^{i\gamma} = e^{i\tilde{\gamma}}$

• 为什么数值不一样?

再看Berry曲率：$\vec{F}=\nabla_B\times\vec{A}=-\frac{\hat{B}}{2B^2}$

同样：$\gamma=\int_S\frac{-\hat{B}}{2B^2}\cdot d\vec{S}=-\frac{\Omega}{2}$，选S为$\vec{B}$环的上球面

还有另一个选择：选$\vec{B}$环路的下球面．由Stokes定理$d\vec{S}$指向球心

$$\tilde{\gamma}=\int_{\tilde{S}}\frac{-\hat{B}}{2B^2}\cdot d\vec{S}=\frac{1}{2}(4\pi-\Omega)=2\pi-\frac{\Omega}{2}$$，等价于γ.

通常的电磁学．$\oint\vec{A}\cdot d\vec{R}=\int_S\vec{B}\cdot d\vec{S}$=磁通，应该与曲面选取无关．这里$\tilde{\gamma}$与$\gamma$数值为什么不同？

• 原因是：$\vec{F}$是磁单极子的磁场！（在$\vec{B}$空间）
（负）方向从中心向外"（$\hat{B}$方向），大小反比于B^2，"磁荷$\frac{1}{2}$"
类比于$g=-\frac{1}{2}$的电场！$\vec{A}$是特殊的规范场！

对于自旋量子数为S的自旋，旋转磁场一周获得$\gamma=-S\Omega$.
或者（从下面看）$\tilde{\gamma}=S(4\pi-\Omega)$．这个不同不应该导致物理上的区别，即$e^{i\gamma}=e^{i\tilde{\gamma}}$，因此$\tilde{\gamma}-\gamma=2\pi\cdot n$，$n\in Z$

⇒ S必须是半整数或整数！⇒ 自旋量子化．
S "磁荷"，产生$\vec{F}$，也是量子化的．

• Berry curvature对整个球面的积分．（$d\vec{S}$方向朝外）

$$\int_{S^2}\vec{F}\cdot d\vec{S}=-S\cdot 4\pi=C\cdot 2\pi,\quad C\in Z$$

可推广到参数$\vec{R}$空间任意封闭曲面．
整数C称为Chern number.

回头再看路径积分：

$$\langle \vec n(t')|e^{-iHt'/\hbar}|\vec n(0)\rangle = \int D\vec n\; e^{iS/\hbar}$$

或 $\langle \vec n|e^{-\beta H}|\vec n\rangle = \int D\vec n\; e^{-S/\hbar}$， $\boxed{\text{其中}H\text{为任意哈密顿}}$

S中的积分 $\int_0^{t'} dt\; i\langle \vec n(t)|\dot{\vec n}(t)\rangle$ 与 $\int_0^{\beta\hbar} d\tau\; i\langle \vec n(\tau)|\dot{\vec n}(\tau)\rangle$

将路径 $\vec n(t)$ 假想为绝热旋转磁场的方向，$|\vec n(t)\rangle$ 为其瞬时本征态，那么当 $\vec n(t')$ 回到 $\vec n(0)$，积分

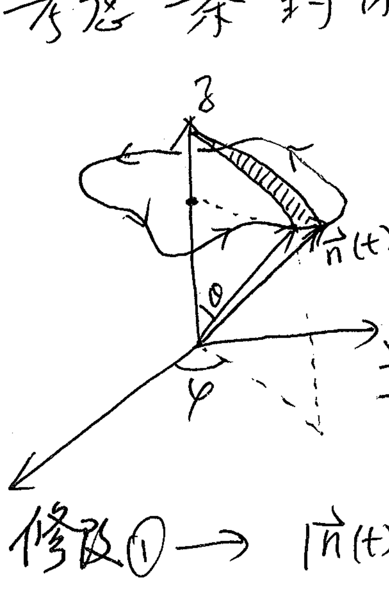
$$\int_0^{t=T} dt\; i\langle \vec n(t)|\dot{\vec n}(t)\rangle = \oint i\,d\vec n\cdot\langle \vec n|\nabla_{\vec n}\vec n\rangle$$

~~就~~给出由路径决定的相位，我们也把它称为 Berry phase.
虽然这里没有"真的"绝热过程.

对于 $S=\frac{1}{2}$ 的自旋 $|\vec n\rangle = e^{ib}\left(\cos\frac{\theta}{2}e^{-\frac{i\varphi}{2}}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{i\varphi}{2}}|\downarrow\rangle\right)$ ①

前面我们导出：$\boxed{\langle \vec n(t)|\dot{\vec n}(t)\rangle = i\left(\dot b - \frac{\dot\varphi}{2}\cos\theta\right)}$

考虑一条"封闭路径"：$|\vec n(t')\rangle = |\vec n(0)\rangle$ （$\langle \vec n|e^{-\beta H}|\vec n\rangle$ 自动满足）
虚时情况：即 $|\vec n(\beta\hbar)\rangle = |\vec n\rangle$



跟踪 $\vec n(t)$，假设 $\vec n(t)$ 绕z轴一圈.

那么 $\varphi(t') = \varphi(0)+2\pi$，$e^{-\frac{i\varphi(t')}{2}} = -e^{-\frac{i\varphi(0)}{2}}$

要保证 $|\vec n(t')\rangle = |\vec n(0)\rangle$ ~~要求~~ ~~$|\vec n(t)\rangle = |\vec n(0)\rangle e^{in2\pi},\ n\in\mathbb{Z}$~~

可选择：$b(t) = \frac{\varphi(t)}{2}$. （或 $b(t) = -\frac{\varphi(t)}{2}$）

修改① $\longrightarrow$ $|\vec n(t)\rangle = \cos\frac{\theta(t)}{2}e^{i0}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta(t)}{2}e^{i\varphi(t)}|\downarrow\rangle \Rightarrow |\vec n(t')\rangle = |\vec n(0)\rangle$

我们来计算 $b(t)=\frac{\varphi(t)}{2}$ 规范选择下，封闭路径的 Berry phase γ_B

$$\gamma_B=-\int_0^{t'}dt\left(\dot b-\frac{\dot\varphi}{2}\cos\theta\right)=\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}\underbrace{(1-\cos\theta)\,d\varphi}_{\text{立体角元}}\longleftarrow\int_0^{t'}dt\; i\langle\vec n(t)|\dot{\vec n}(t)\rangle$$

$$=\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}\int_0^{\theta}\sin\theta\,d\theta\,d\varphi=-\frac{\Omega}{2}\xrightarrow{\text{推广}}-S\Omega\rightarrow$$ Berry phase 的几何意义，与路径所张的立体角有关.

☆ 如果我们选择 $b(t)=-\frac{\varphi(t)}{2}$，同样保证 $|\vec n(t')\rangle=|\vec n(0)\rangle$

但是 $$\gamma_B=-\int_0^{t'}dt\left[-\frac{\dot\varphi}{2}(1+\cos\theta)\right]=-\frac{1}{2}\left[\int_0^{2\pi}(1-\cos\theta)\,d\varphi-4\pi\right]$$

$$=\frac{4\pi}{2}-\frac{\Omega}{2}=2\pi-\frac{\Omega}{2}\qquad(\Omega\rightarrow\Omega-4\pi)$$

(或 $\Omega\rightarrow\Omega+4\pi$) 反过来看.

数值相差 2π，没有物理影响！

- 对于一般的 S (自旋量子数)，相差 $S\cdot4\pi$.

由于不同的规范选择不应该有可观测效量，因此 $S\cdot4\pi$

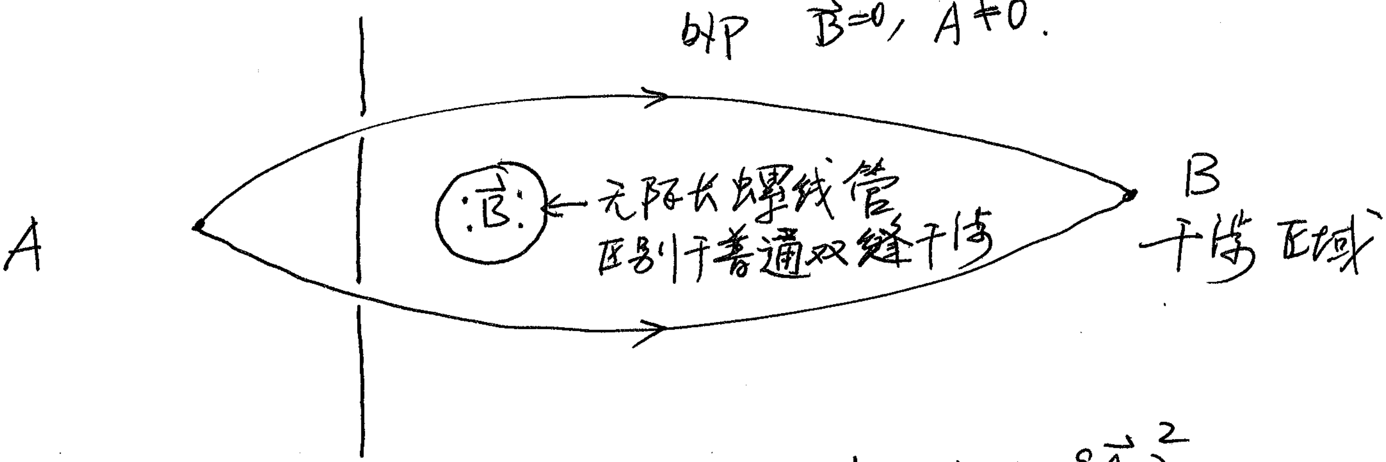
必须是 2π 的整数倍 $\left(e^{i\gamma_B}=e^{i(\gamma_B+n\cdot2\pi)}\right)$

$\Rightarrow$ S 是 $\frac{1}{2}$ 的整数倍.

我们利用 Berry phase 证明了自旋量子数是 $\frac{1}{2}$ 的整数倍！

- z 轴是任意选定的.

§ A-B效应再谈



我们硬解过这个问题： $H=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla-\frac{q\vec A}{c}\right)^2$

求解 $i\hbar\frac{\partial\psi(\vec x,t)}{\partial t}=H\psi(\vec x,t)$

解为： $\psi(\vec x,t)=e^{ig(\vec x)}\psi'(\vec x,t)$， $g(\vec x)=\frac{q}{\hbar c}\int_0^{\vec x}\vec A(\vec x')\cdot d\vec x'$

$\psi'(\vec x,t)$ 是没有螺线管的解.

在干涉点B，从管上P与下P到达的波函数相位差

$$\phi=g_{down}-g_{up}=2\pi\frac{\Phi_B}{hc/q}$$，Φ_B为磁通.

$$=\frac{q}{\hbar c}\oint\vec A(\vec x')\cdot d\vec x'$$

• 下面我们利用路径积分方法来分析A-B效应

$t=t_0$，粒子从$\vec x_0$出发（A点），计算$t=t'$到达B点$\vec x'$的几率幅

$$\langle\vec x',t'|e^{-\frac{iH(t'-t_0)}{\hbar}}|\vec x_0,t_0\rangle=\int D\vec x\int D\vec p\;e^{\frac{i}{\hbar}S}$$

$$S=\int_{t_0}^{t'}dt\left[\vec p(t)\cdot\dot{\vec x}(t)-H(\vec x(t),\vec p(t))\right]\leftarrow\mathcal{L}$$

$$=\int_{t_0}^{t'}dt\left[\left(\vec p-\frac{q\vec A}{c}\right)\cdot\dot{\vec x}-\left(\vec p-\frac{q\vec A}{c}\right)^2/2m-\frac{m^2\dot{\vec x}^2}{2m}+\frac{m\dot{\vec x}^2}{2}+\frac{q\vec A\cdot\dot{\vec x}}{c}\right]$$

对P高斯积分： $\langle\vec x'|e^{-\frac{iH(t'-t_0)}{\hbar}}|\vec x_0\rangle=\int D\vec x\;e^{\frac{i}{\hbar}S}$

$$S=\int_{t_0}^{t'}dt\,\mathcal{L},\quad \mathcal{L}=\mathcal{L}^{(0)}+\frac{q\vec A\cdot\dot{\vec x}}{c},\quad \mathcal{L}^{(0)}=\frac{m\dot{\vec x}^2}{2}$$

$\mathcal{L}^{(0)}$ 是没有螺线管时拉氏量，多出的 $\frac{q\vec{A}\cdot\dot{\vec{x}}}{c}$ 的积分给出Berry相

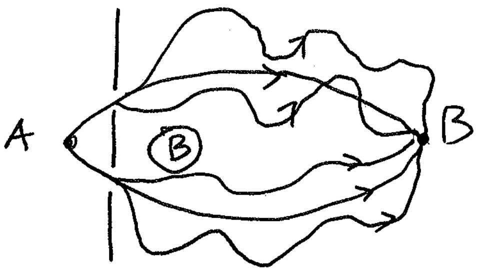
将S改成离散形式：$t'-t_0$ 分成N分，$t_N=t'$，

$$S=\sum_{k=1}^{N} S_k=\sum_k \int_{t_k}^{t_{k+1}} dt\left(\mathcal{L}^{(0)}+\frac{q}{c}\vec{A}\cdot\dot{\vec{x}}\right)$$

$$=\sum_k\left[S_k^{(0)}+\frac{q}{c}\int_{\vec{x}(t_k)}^{\vec{x}(t_{k+1})}\vec{A}(\vec{x})\cdot d\vec{x}\right]$$

$$=S^{(0)}+\frac{q}{c}\int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}'}\vec{A}(\vec{x})\cdot d\vec{x}$$

电动力学：$\oint \vec{A}\cdot d\vec{x}=\Phi_B$



$$\langle\vec{x}'|e^{-\frac{iH(t'-t_0)}{\hbar}}|\vec{x}_0\rangle=\int_{above}D\vec{x}\, e^{\frac{iS^{(0)}}{\hbar}}\cdot e^{\frac{iq}{\hbar c}\int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}'}\vec{A}\cdot d\vec{x}}$$

$$+\int_{below}D\vec{x}\, e^{\frac{iS^{(0)}}{\hbar}}\cdot e^{\frac{iq}{\hbar c}\int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}'}\vec{A}\cdot d\vec{x}}$$

所有above路径 $\int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}'}\vec{A}\cdot d\vec{x}$ 相同，因为任意两条之间没有磁通

同样，所有below路径此积分也相同。

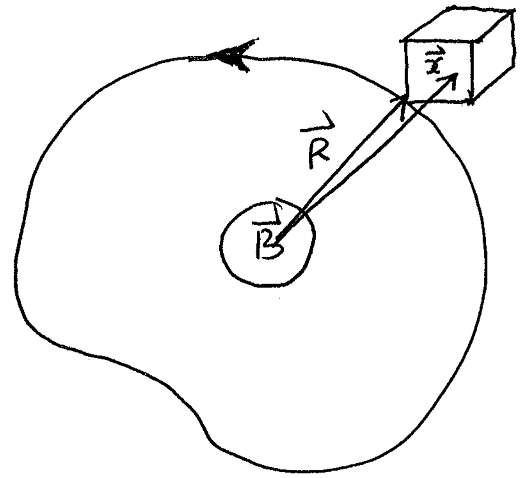
考虑对称情况：$\int_{above}D\vec{x}\, e^{\frac{iS^{(0)}}{\hbar}}=\int_{below}D\vec{x}\, e^{\frac{iS^{(0)}}{\hbar}}$

$$\langle\vec{x}'|e^{-\frac{iH(t'-t_0)}{\hbar}}|\vec{x}_0\rangle=\int_{above}D\vec{x}\, e^{\frac{iS^{(0)}}{\hbar}}\cdot e^{\frac{iq}{\hbar c}\int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}'}\vec{A}\cdot d\vec{x}}\times\left[1+e^{\frac{iq}{\hbar c}\oint\vec{A}\cdot d\vec{x}}\right]$$

从上P与下P到达的几率幅相位差了是

$$\phi=\frac{2\pi q}{hc}\oint\vec{A}\cdot d\vec{x}=2\pi\frac{\Phi_B}{\frac{hc}{q}}.$$

这个相位其实是Berry phase.



考虑一个带电粒子处于小盒子内(无限深势阱)。$\vec R$ 是盒子左前下顶点的位置,$\vec x$ 是粒子的位置。没有 $\vec B$ 时,设粒子处于第n个能级,波函数为(阱内)

$$\psi_n^{(0)}(\vec x-\vec R)=\begin{cases}\left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{3}{2}}\sin\frac{n\pi}{a}(x_1-R_1)\sin\frac{n\pi}{a}(x_2-R_2)\sin\frac{n\pi}{a}(x_3-R_3) & \text{阱内}\\ 0 & \text{阱外}\end{cases}$$

当加上螺线管,$\vec R$ 处有矢势 $\vec A(\vec R)$。~~粒子会感受到,盒内的A不变,都是A(R)~~ 此时H变成

$$H=\frac{1}{2m}\left(\vec p-\frac{q\vec A(\vec x)}{c}\right)^2+V(\vec x-\vec R) \leftarrow \text{势阱}$$

选定盒子的初位置 $\vec R(t=0)$ 处 $\vec A(\vec R(0))=0$。

~~$\psi_n(\vec x-\vec R(0))$ 就是没有B的波函数 $\psi_n^{(0)}(\vec x-\vec R(0))$~~

缓慢移动盒子,t时刻到达 $\vec R(t)$,则波函数为(瞬时本征态)

$$\psi_n(\vec x-\vec R(t))=\cancel{e^{\frac{iq}{\hbar c}\int_{\vec R(0)}^{\vec R(t)}\vec A(\vec R)\cdot d\vec R}\,\psi_n(\vec x-\vec R)}$$

$$=e^{\frac{iq}{\hbar c}\int_{\vec R(t)}^{\vec x}\vec A(\vec x')\cdot d\vec x'}\,\psi_n^{(0)}(\vec x-\vec R(t))$$

这是由于: $\left(-i\hbar\nabla-\frac{q\vec A}{c}\right)\psi_n(\vec x-\vec R(t))=e^{\frac{iq}{\hbar c}\int_{\vec R(t)}^{\vec x}\vec A(\vec x')\cdot d\vec x'}(-i\hbar\nabla)\psi_n^{(0)}(\vec x-\vec R(t))$

满足 $H(\vec R(t))\psi_n(\vec x-\vec R(t))=E_n\psi_n(\vec x-\vec R(t))$

当盒子回到出发地 $\vec R(0)$,($\int d^dx\,\psi_n^{(0)*}(\vec x-\vec R)\nabla_R\psi_n^{(0)}(\vec x-\vec R)=0$)

$\gamma=\oint i\langle n(\vec R)|\nabla_R n(\vec R)\rangle\cdot d\vec R$, $\langle\vec x|n(\vec R)\rangle=\psi_n(\vec x-\vec R)$, $A(\vec x)=A(\vec R)$

$=\oint i\int d^dx\,\psi_n^{(0)*}(\vec x-\vec R(t))\,\psi_n^{(0)}(\vec x-\vec R(t))\left(\frac{-iq}{\hbar c}\right)\vec A(\vec R)\cdot d\vec R$

真实矢势

$=\oint\frac{q}{\hbar c}\vec A(\vec R)\cdot d\vec R$, Berry connection $\vec{\mathcal{A}}(\vec R)=\frac{q}{\hbar c}\vec A(\vec R)$

$=2\pi\Phi_B/\left(\frac{hc}{q}\right)$