量子力学相位因子*

李　华　钟

(中山大学高等学术研究中心及物理系　广州　510275)

"量子化,对称和相位因子——20世纪物理学的主旋律"

——引自杨振宁在中国科学院成立50周年大会上的学术报告

摘　要　文章以电磁场为例说明规范场和相位因子的关系,说明相位因子何以是20世纪物理学的主旋律之一.文章就目前文献或教材中流行着的一些量子力学相位概念作分析,指出必须区分清楚不可积相位和可积相位.文章还专门讨论了不可积相位的概念及其重要性.

关键词　相位因子,不可积相位,量子几何相位

PHASE FACTORS IN QUANTUM MECHANICS

LI Hua-Zhong

(*Advanced Research Center and Physics Department, Zhongshan University, Guangzhou 510275, China*)

Abstract The concept of non-integrable phase factors in quantum mechanics is analysed in detail. Certain misunderstandings in the current literature about non-integrable phase factors such as Berry′s phase, Aharonov-Anandan, Aharonov-Casher, and time-dependent Berry′s phase *etc* are critically reviewed. The relationships between the non-integrable phase factors and gauge fields are also explained.

Key words phase factors, non-integrable phase factor, quantum geometry phase factors

1　相位因子

量子力学基本的物理量是波函数.波函数 $\Psi(x,t)$ 是一个实数时间空间参量 (x,t) 的函数,其复数形式写成模 $|\Psi(x,t)|$ 和相位因子 $e^{i\gamma(t)}$ 的乘积,即

$$\Psi(x,t)=|\Psi(x,t)|e^{i\gamma(t)}.$$

从量子力学的初等原理已经知道,作为与实验结果联系,最重要的是 $|\Psi(x,t)|^2$,一般称其为在某一瞬时 t,在空间 x 与 $x+\Delta x$ 间测到粒子的几率密度. $\Psi(x,t)$ 是相应粒子的波函数.迄今量子力学已经在实践中验证了70多年了.人们可以说对于波函数相当清楚了解了.知道计算它的方法和它的物理意义.但是仔细地考虑一下,可以发现,一本量子力学参考书可以写上千页,仍然是不完备的.因为量子力学仍然在发展中,尤其是近10年来.20世纪初期出现的量子理论经过一个世纪锤炼,到20世纪末却忽然呈现了物理基础最引人注目的发展.这就是:过去我们对量子力学的了解几乎大部分是对波函数幅的了解.

对波函数的相位因子虽也有一般的知识,可是远未足够深入,几乎到最近十多年才发现,原来还有不少奇妙的现象和应用前景,足以构成21世纪物理学的重要发展和促成21世纪技术的重要发明.这些问题大都与波函数的相位因子有关.举例来说,量子霍尔效应的分数统计和分数电荷态,原子或分子物质波原子激光的产生和干涉的应用技术,量子几何相位、量子纠缠态及导致的量子计算和量子信息原理和技术,这些都是当今物理学界人士所耳熟的.虽然我们知道所有这些都与波函数的相位因子有关,

* 香港中山大学高等学术研究中心基金资助项目

2001-05-14收到初稿,2001-06-29修回

然而,实际我们对这个相位因子从根本来说所知甚少.量子力学中一般力学量的算子对易关系都可以很清楚地确定,而波函数相位作为一个力学量的算子表示,迄今还不是已经公认确定无疑.相位的绝对值和瞬时值迄今还不是人们的兴趣,我们只知道相位差有物理意义.

一般我们熟悉的物理量只与粒子初态末态有关,这就是所谓状态函数.有一种相位差不只依赖初末态,而且与初末态之间的整个过渡过程有关.虽然依赖路径的相位因子早在1930年就已经被狄拉克阐述,可是到20世纪80年代中期人们才确实认识到它的重要性,就是几何相位.对量子几何相位认识的历史,以及它在今天仍然被某些人误解,这正好表明了我们对相位和相位因子的了解多么肤浅和贫乏.事实上,这种依赖过程的相位因子展示了量子力学在过去长期被忽视而又长期争论的隐蔽的一面,即整体或称拓扑,或称大范围的性质.Aharonov-Bohm效应,就是一著名的例子.这也是波函数相位因子的效应.与波函数的幅的效应不同,这一现象一直争论了近30年.到1986年后才获得物理学界的一致认同.这一效应表明在有磁通贯穿的平面上,带电粒子即使不受到任何电磁力的作用,它的相位却受到电磁势的影响.这些影响依赖于带电粒子取用的路径.粒子相位因子对于路径不同的同伦类(homotopy)取不同的值.

现在大学生的量子力学教科书都写入了Aharonov-Bohm效应(简称A-B效应).人们已经充分注意到A-B效应揭示两点基本的物理概念的变革:一是电磁矢量势并非一个数学的简写或工具,它有物理效果,有物理意义;二是波函数相位除了粒子的力场和场作用可以施以影响产生变化外,在无力场作用下,它与电子在运动的空间的拓扑结构有关.电子运动的运动学(kinetics)拓扑结构决定电子波函数相位,量子几何相位也就是Aharonov-Bohm相位的族类.

2 电磁场和相位因子

由于上面所讲的相位性质,电磁学可以完全改写成另外一种形式.吴大峻(T.T.Wu)和杨振宁(C.N.Yang)发现(见Phys.Rev.D,1975年第12卷第3845页):电磁学的电磁场强度,不足以完整描述电磁现象.如用电磁势,则过量地描述(over-describe)电磁现象.这就是说,根据A-B效应所展示,有些物理现象如A-B效应不是电磁场强度所能描述的.电子在不受电场磁场的作用下,仍然可以有相位改变,即还需要有矢量势 $\boldsymbol{A}$ 来描述电子波函数相位的改变.但是许多个不同的矢量势 $\boldsymbol{A}$ 却得出同一的物理描述.因为对于规范变换,电磁现象不变,由规范变换联系的矢量势的物理效应是相同的.所以 $\boldsymbol{A}$ 的描述中含有多余的因素,采用相位因子 $\Phi = e^{i\int A(x,t)dx}$ 就能去除掉这些多余的东西.相位因子能够不多不少,恰好完整地进行描述,因为相位因子对于 $\boldsymbol{A}$ 的规范变换不变.这一发现现在还没有被许多物理教学工作者所熟识,我们相信这一发现的影响将会是十分深远的.

相位因子怎样去描述电磁现象.现在知道的办法是利用"环路相位因子".例如我们要讨论区域 R 里的电磁现象.R 的边界为 C.设想将 R 划分为许多个小区域,如图1所示.在 R 区内选取某一个小区 q,它的边界为 $abcd$,构造一个环路积分

$$\oint \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}, \tag{1}$$

式中 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$ 是这一小区 q 内某瞬时在空间位置 $\boldsymbol{x}$ 的矢量势.小区的边界环路是 $abcd$.再构造一个相因子

$$\Phi(t) = e^{i\frac{e}{h}\oint_{abcd}A(x,t)\,\mathrm{d}x}. \tag{2}$$

我们研究小区 q 内任意一点 $\boldsymbol{r}$ 上的相因子

$$\Phi(\boldsymbol{r},t) = e^{\frac{i}{\Delta s}\oint A(r,x,t)\,\mathrm{d}x}, \tag{3}$$

设令取定 $\boldsymbol{r}$ 后,小区划分,再划分,愈来愈小,但路径包含 $\boldsymbol{r}$ 点,即环路积分 $abcd$ 所包围面积

$$\Delta S = \diamond abcd \to 0,$$

$$\oint \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{x},t)\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})\cdot\Delta S. \tag{4}$$

环路 $abcd$ 收缩到位于 $\boldsymbol{r}$ 一点的无穷小路径,而环路不包含奇异点,或者说环路可收缩为一点.$\Phi(\boldsymbol{r},t)$ 所描述的物理意义如(4)式所示,等价于磁场强度 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$.如果在 r 处为一奇异点,例如是一场源或电荷(磁荷)所在,环路包含了奇异点,则环路不能收缩为一点,这时(4)式不成立.这时 $\Phi(\boldsymbol{r},t)$ 所给出的便不是场强 $\boldsymbol{B}$ 所等价的了.如果,环路 $abcd$ 包含了磁通 ϕ,这时 Φ 就描述了A-B效应.

我们注意到 Φ 就是上文所说的相位因子,Φ 是对规范变换

$$\boldsymbol{A} \to A' = A + \nabla\lambda \tag{5}$$

不变,在环路积分下 $e^{2\pi n i}=1$,所以它取消了由于规范变换不变引起的矢量势的多余信息.

由上可见,环路相位因子可以用来描述电磁现

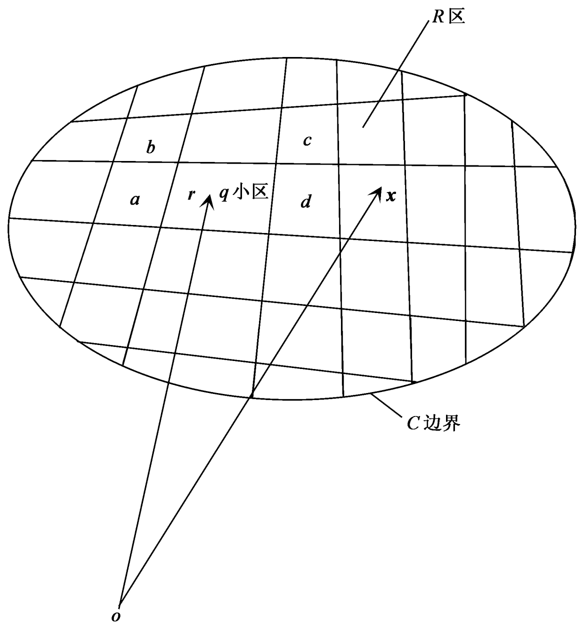

图1　环路相位因子描述
(x 为空间任一点,可在 $abcd$ 之内或外; r 处可以有磁通穿过)

象,它包含了场强 $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{B}$ 所描述的信息,它又包含了矢量势 $\boldsymbol{A}$ 描述的信息.它既补足了场强描述的不足,又去除了矢势描述的多余成分.当环路不包含着场源时,相位因子称为可积的;当环路包围着场源时,相位因子称为不可积的.我们应注意,要完整描述全体空间各点的电磁场,需要取一切可能的环路.所以说,所有的相位因子 $\exp\frac{\mathrm{i}e}{hc}\oint A\mathrm{d}x$ 在所有环路上完整地描述了电磁场.

对于电磁现象或者说阿贝尔规范场来说,据目前所知,环路积分,或场强描述或矢势描述都只是数学形式的不同.但是如果实验上发现磁单极的存在,那就肯定环路积分可以包括对磁单极的描述,把纤维丛数学引入到物理学.磁单极问题,从实验方面来看是悬而未决的问题;从理论上来看则是量子力学相位理论的一个自然的结果.

近代和现代物理学中,有两位伟大的理论物理学家,他们一再强调量子力学波函数相位的重要性和我们对相位的知识贫乏.他们是狄拉克(P.A.M. Dirac) 和杨振宁.早在1932年,狄拉克便从波函数相位十分一般的性质和物理学的基础原则出发,用严密的逻辑,论证了量子力学框架中电磁对称的合理存在,量子力学框架容许存在单个磁荷,已存在的理论不出现内部矛盾,现有理论也不必引入更多的新的元素.这一观点在物理学界中时隐时现地游弋了70年,迄今实验还未发现单磁荷.狄拉克本人在晚年却倾向否定自己几十年来所持的观点,而转向支持磁单极不存在的观点!但是他仍然坚持量子力学相位因子的重要意义,甚至把相位因子看成是比量子力学算子对易关系更为基本的东西[1].

磁单极虽未被实验发现,但磁单极场这种类型的作用则是已经存在于原子分子的结构内部之中.磁单极如果一旦被实验发现,那固然是人类对于自然界认识的一次突破.但即使磁单极不存在于自然界,那么给予的理解也可能是人类对自然界认识的又一次飞跃.因为大自然禁戒了某些理论上合理的存在,往往暗示着有很根本的新的自然规律在起作用.虽然暂时我们对这新的规律还未认识,但禁戒的存在揭示着人们要探求的目标和方向.弱电统一作用的希格斯(Higg) 粒子也经过了三四十年的探索而仍未发现.如果 Higg 粒子果真不存在,那么弱电统一的标准模型将面临严重的挑战,弱电理论将会大大地深化,突破现有的框架.磁单极也是类似的道理.

需要注意,上述的电磁描述,本来是经典电磁场的描述.现在如果引入不可积的相位因子描述,自然就引入了电子与电磁场的相互作用,即引入了电磁规范场;这种描述一开始就从电子的量子力学波函数开始,从这个角度看,电子与电磁场的相互作用从根本上说是量子理论,只有量子理论才能完整而惟一地确定电子与电磁场相互作用.

电子波函数 $\Psi(x) = \Psi_0(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma}$,我们上面讲过,时空某点的相位没有物理意义,不是可观察量,一般来说,我们感兴趣的是相位差,严格地说,相位差有 $2n\pi\mathrm{i}$ 的不定因子也不是可观察量,只有相位因子才是可观察量.暂撇开严格的说法,仍然视相位差(除去 $2n\pi$ 的不定因子) 为可观察的物理量.通常一道波列在空间传播,在空间有限距离两点的相位差可以是有确定值的可观察量(除去 $2n\pi$ 因子,以下同此) ,它导致通常的干涉绕射等现象.如果有限距离两点间的相位差有一定值是可观察量,则这时的相位差只依赖于两端点.但狄拉克指出还存在一种可能性,即这一有限距离的相位差仍然是不定的,没有确定值.它的值依赖于连接两点的“路径”,这时只有相邻两点的相位差才有确定值.这种相位因子称为“不可积的”.狄拉克论证引入不可积相位因子不会导致量子力学任何含糊或需要的修正.量子力学并

1)　作者感谢葛墨林教授对这一信息的讨论

不要求有限距离两处的相位差要确定.这种确定性的要求实在多余,应该从物理中排除出去.狄拉克表明,排除掉这确定性的过分要求,就可以确定电磁互作用是电子通规范场即电磁场的互作用运动方程式.我们在下面一节将演绎这一观点.

3 不可积相位因子和规范场

上面我们讲过,电子波函数记为 $\psi(x) = \psi_0(x) e^{i\gamma}$, $\psi_0(x)$为实函数, $e^{i\gamma}$称为相位因子.正如大家所熟知,在空时某点的相位值没有物理意义,因此在某一点的位相可以是不确定的而对物理没有影响.只有两点间的位相差,才有确定的值,才有物理意义.狄拉克指出进一步设想,只有相邻两点的相位差才有确定的值,在有限距离的两点间波函数的相位差也是不确定的,它依赖于联结两点的路径.这样的相位性质称为相位的不可积性.问题是这样设想是否在理论上一致,能否保持量子力学不会有自相矛盾,是否会由于这种不确定而导致量子力学推论变得含糊不确定了?而且这样设想是否有新的意义的推论?答案是:能够明确给出必要条件,使引入不可积的相位不导致量子力学任何含糊或任何修正;相反,量子力学并没有要求有限距离两点相位差要确定,这种确定性是多余的,一旦排除了这种多余的过分要求,就能揭露出新的物理内容——规范场.这就是杨振宁指出的20世纪三个主旋律之一的相位因子的重要意义.毫无疑问,规范场是20世纪物理基础的最重要发现之一,而规范场来自不可积相位因子.

以下我们简单讨论,从波函数的不可积相因子出发可以引导出电磁场麦克斯韦方程和电子的狄拉克方程.把电子波函数写成为具有不可积相因子的形式:

$$\overline{\Psi}(x) = \psi(x) e^{i\beta(x)}, \tag{6}$$

式中 $\psi(x)$为通常的单值的波函数, $e^{i\beta(x)}$代表不可积的相因子, $\beta(x)$是不确定的,即 $\beta(x)$是 x 的多值函数. $\beta(x)$虽不确定,但它在邻近两点的差值则是确定的,即其空间导数是确定定义的[1]:

$$k_\nu = \frac{\partial \beta(x)}{\partial x_\nu}, \tag{7}$$

k_ν 是完全确定的,但 $k_\nu(x)$满足不可积条件:

$$\frac{\partial k_\tau}{\partial x_\nu} \neq \frac{\partial k_\nu}{\partial x_\tau}. \tag{8}$$

取 $k_\nu(x)$的环流积分,应用 Stokes 定理,得到

$$\oint k_\mu(x)\, dx_\mu = \iint_s \mathrm{curl}\, \boldsymbol{k} \cdot d\boldsymbol{s}, \tag{9}$$

此处 $\boldsymbol{k}$, $d\boldsymbol{s}$ 均是四维矢量.由于不可积条件,(8),(9)式不为零.

设令 $k_\nu(x)$与电磁势成正比,即

$$k_\nu(x) = -eA_\nu(x), \tag{10}$$

则

$$\frac{\partial k_\nu(x)}{\partial x_\mu} - \frac{\partial k_\mu(x)}{\partial x_\nu} = e\left(\frac{\partial A_\mu(x)}{\partial x_\nu} - \frac{\partial A_\nu(x)}{\partial x_\mu}\right) \equiv eF_{\mu\nu}(x). \tag{11}$$

可以证明,由(11)式定义的 $F_{\mu\nu}(x)$自动满足

$$\varepsilon_{\sigma\lambda\mu\nu} \frac{\partial F_{\mu\nu}(x)}{\partial x_\lambda} = 0, \tag{12}$$

这就是麦克斯韦方程之一组,其中 $\varepsilon_{\sigma\lambda\mu\nu}$为全反对称的.

电子波函数的相位依赖于路径

$$\beta(x) = -e\int_p^x A_\nu(x)\, dx_\nu, \tag{13}$$

p 为无穷远处到 x 点的路径.

可见 $A_\mu(x)$是电磁矢量势.

现在再指出用不可积的相因子可以自然地引入规范场,(13)式的电磁矢势就是规范势.考虑以不可积相位表述的电子波函数:

$$\Psi(x) = \psi(x) e^{i\beta(x)}, \tag{14}$$

取其导数

$$\frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} = e^{i\beta(x)}\left(\frac{\partial}{\partial x_\nu} + ik_\nu(x)\right)\psi(x) = e^{i\beta(x)}\left(\frac{\partial}{\partial x_\nu} - ieA_\nu(x)\right)\psi(x), \tag{15}$$

上式表明,如果 $\Psi(x)$满足一个包含一阶微商算子$\frac{\partial}{\partial x_\nu}$的运动方程,则 $\psi(x)$满足同一个方程,但是要作下列代换:

$$\frac{\partial}{\partial x_\nu} \to \left(\frac{\partial}{\partial x_\nu} - ieA(x)\right), \tag{16}$$

或者

$$P_\mu \to P_\mu + eA_\mu(x). \tag{17}$$

如写成包含有不可积相位因子的电子波函数 $\Psi(x)$满足狄拉克方程

$$\left(\gamma_\mu i \frac{\partial}{\partial x_\mu} - m\right)\Psi(x) = 0, \tag{18}$$

则电子波函数的通常形式 $\psi(x)$,不含不可积相因子的波函数,满足

1) 在本节讨论中, μ, ν取 0,1,2,3

$$\left[\gamma_\mu\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\mu}+eA_\mu(x)\right)-m\right]\psi(x)=0, \quad (19)$$

这就是通常的电子与电磁作用的运动方程.

显然,(19)式对于定域规范变换

$$\psi(x)\rightarrow\psi(x)e^{i\lambda(x)},$$

$$A_\mu(x)\rightarrow A_\mu(x)+\frac{\partial\lambda(x)}{\partial x_\mu} \quad (20)$$

是不变的,因此 $A_\mu(x)$ 是规范场.

由此可见,对于电磁相互作用有以下两种表述方式:

(1) 依赖规范的表述,概括为(19),(20)式,这时波函数相位不依赖于路径而是一般通常的波函数,这是不依赖路径的表述;

(2) 依赖于路径的表述,概括为(13),(14),(18)式,这时波函数相位是依赖于路径的,但是却是与规范无关的,是不依赖于规范的表述.

波函数

$$\Psi(x,p)=\psi(x)\exp\left[-ie\int_{-\infty}^{p}A_\mu(x)\mathrm{d}x_\mu\right] \quad (21)$$

在作规范变换时,规范效应都被不可积相因子中的变换抵消掉,所以 $\Psi(x,p)$ 是依赖路径而与规范无关的形式.这两种方式是等价的.由此可见,对于规范场有以下两种表述方式:

(1) 通常的表述方式,从定域规范变换(20)式出发,要求系统的拉格朗日量对于定域规范不变,导致(16)式或(17)式,这是一般传统的做法,杨振宁称之为微分的形式;

(2) 本节讨论的方式,从不可积相因子出发来引入规范场,这是近年杨振宁所倡导的规范场的积分形式.

这两种表述对阿贝尔规范场来说是等价的.但是推广到非阿贝尔规范场,积分形式就有很大的威力,它能描述不单只是定域的物理现象,它还可以描述整体的,或称大范围的或称拓扑的现象.这就是近年来超弦理论的起点.

由这一节的论证,我们可以清楚地看到不可积相位因子同规范场的密切关系.杨振宁在中国科学院成立50周年的学术报告的标题指出,量子化、对称和相位因子是20世纪物理学的主旋律.他又指出"规范场"这不是一个合适的名称,它应该称为"相位场".无论是不可积相位因子,还是规范场的理论,还正在发展中.本文只能讨论阿贝尔规范场,即电磁场,它在当代的重要发展是非阿贝尔规范场理论.

继1954年杨振宁-米尔斯(Yang-Mills)引入非阿贝尔规范场的微分形式,1974年杨振宁把不可积相位因子推广到非阿贝尔规范理论(见 Phys. Rev. Lett.,1994年第33卷第445页),建立了非阿贝尔规范场的积分形式.设非阿贝尔规范群 G,其生成为 X_k,杨提出规范势 W_μ 沿无穷小长度 d_x 路径的不可积相位因子为

$$\varphi_{x,x+\mathrm{d}x}=I+gw_\mu^a x_a\mathrm{d}x^\mu.$$

非阿贝尔规范场强为

$$f_{\mu\nu}^a(x)=\frac{\partial w_\nu^a}{\partial x_\mu}-\frac{\partial w_\mu^a}{\partial x_\nu}+c_{bc}^a w_\mu^b w_\nu^c,$$

其中 C_{bc}^a 为 G 的结构常数.

1975年我们根据这不可积相因子讨论非阿贝尔规范场的对偶荷(磁单极)的概念,即基于不可积相位因子的规范场积分表式,可以建立像磁单极场这类整体性质(或称拓扑或大范围的性质),这是不可积相位因子或积分表示的有力之处[见《中山大学学报》(自然科学版)1975年第3期和《物理学报》1976年第25卷第509页].

4 相位的可积和不可积性

上面我们已经讲到,波函数的相位因子从根本来说有两种:一种是叫做可积的相位因子,或者简单地只专注于它的相位就叫做相位,这就是通常物理书籍上讲的相位;另一种被称为"不可积相位因子".这两种相位或相位因子具有很不相同的物理性质.我们曾经详细地指出它们的重要区别,有的量子力学教科书忽视这一点.

事实上,在物理学发展的历史里确定有一段时间忽略了不可积相位因子的存在.但自从1984年M.V.Berry发现绝热几何相位和1983年B.Simon对这个相位的拓扑学解释以来,人们已经做了几十个实验去证明这种不可积相位的存在(即绝热几何相位的存在).贝里相位因子是一种不可积的相位因子,这是贝里工作的贡献和重要性.只讲这个相位的公式存在,不明白这个相位因子的不可积性等于抹杀了贝里工作的最重要之处.因此,现在出版的量子力学教科书既然写入了贝里相位就不应该忽视或混淆可积相位与不可积相位.

从许多量子力学教科书都可以找到含时薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\mathrm{d}t}|\Psi(t)\rangle=H(\lambda(t))|\Psi(t)\rangle \quad (22)$$

的绝热近似解法.$\lambda(t)$ 是哈密顿 H 所依赖的参数,

它是一组依赖时间的参数 $\lambda=\{\lambda_1(t),\lambda_2(t),\cdots\}$.按照标准的绝热定理,以及本征函数的任意相位,如 $t=0$ 时系统初态是哈密顿的本征态 $|n[\lambda(t)]\rangle_{t=0}$,则在 λ 的绝热变化过程中,时间 t 时系统仍处于瞬时定态 $|\Psi(t)\rangle$,它与初态只差一相位因子.这相位因子在 Berry 以前一般都认为只是一个可积的相位因子:

$$|\Psi(t)\rangle=\exp\left|-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t' E_n(\lambda(t'))\right|\cdot \exp(\mathrm{i}\gamma_n(t))|n(\lambda(t))\rangle_{t=0}. \quad (23)$$

如果 $\gamma_n(t)$ 是一般的可积的相位,那末按照约定量子力学波函数相位的惯约,$\gamma_n(t)$ 可以被重新定义为零,得到

$$|\Psi(t)\rangle=\exp\left|-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t' E_n(\lambda(t'))\right||n(\lambda(t))\rangle_{t=0}, \quad (24)$$

这就是 60 年来的一般接受的理解,并且已经推导出.$\gamma_n(t)$ 的表示式为

$$\gamma_n(t)=\mathrm{i}\int_0^t\langle n(\lambda)|\nabla n(\lambda)\rangle \mathrm{d}\lambda, \quad (25)$$

式中的 $\gamma_n(t)$ 是早已知道的,应该十分注意,$\gamma_n(t)$ 不是 Berry 绝热相位,它只是一般的可积相位.它可以用"重整"的办法消去.Berry 的原创论文的重要贡献在于,它指出,关键之处是 γ_n 对于一循回演化过程是有意义的,即系统哈密顿绝热地从时间 t_0 到 t_0+T,参数 λ 绝热地从 $\lambda(t_0)$ 缓变到 $\lambda(t_0+T)$,

$$H(t_0+T)=H(t_0),\ \lambda(t_0+T)=\lambda(t_0),$$

$$\gamma_n(C)=\mathrm{i}\oint_0^T\langle n(\lambda)|\nabla n(\lambda)\rangle \mathrm{d}\lambda, \quad (26)$$

式中 C 是参数 $\lambda(t)$ 空间的闭合回路,取 $t_0=0$,$\lambda(T)=\lambda(0)$,T 是 λ 变化的一周期的时间.对于可积相位,$\gamma_n(T)=\gamma_n(0)$,对于不可积相位,$\gamma_n(T)\neq\gamma_n(0)$.不可积的 $\gamma_n(\lambda)$ 不是 λ 的单值函数,当 $\gamma(\lambda)$ 沿闭路 C 延拓时,γ_n 不是 λ 的单值函数,γ_n 是不可积相位.

所以 Berry 发现的绝热相位是(26)式的 $\gamma_n(C)$,它是对循回绝热过程的不可积相位,它不可以由"重整"重新定义而消去.

5 Berry 相位的一些误区

上节我们阐明相位的可积和不可积的重要区别,也指出 Berry 的绝热相位是不可积的.Berry 相位是已经写入许多量子力学教科书的内容.由于它只需要一般的量子力学基础知识就可以推导出结果,因而引起不少人的兴趣,写了不少论文.事实上,Berry 相位的含义,要比一般认识的深得多.它的重要之处往往被误解和忽视.我们认为应该注意:

(1) Berry 相位是不可积相位,它依赖于过程,而不只是系统的始态和终态,即它依赖全部中间态.

(2) Berry 绝热相位是对循回过程定义的,Aharonov - Anandan 非绝热过程的几何相位也是对循回过程定义的,因而有的教科书上说的

$$\gamma_n(t)=\mathrm{i}\int_0^t\langle n(\boldsymbol{R})|\nabla n(\boldsymbol{R})\rangle \mathrm{d}\boldsymbol{R}, \quad (27)$$

即上面的(25)式,它不是 Berry 相位,(26)式才是 Berry 相位,即

$$\gamma_n(T)=\mathrm{i}\oint_C\langle n(\lambda)|\nabla n(\lambda)\rangle \mathrm{d}\lambda, \quad (28)$$

式中 T 是一个循回周期,C 是在这个循回周期中,参数 $\lambda(\lambda_1,\lambda_2,\cdots\lambda_i\cdots)$ 张开的空间中 λ 变化所刻划的路径,它是闭合回路.

至于非循回过程的量子几何相位则另有定义,需要很仔细地讨论,本文将不涉及.

(3) Berry 相位的正确解释必须引用拓扑学的概念,否则不可能有数学上逻辑一致的没有内在矛盾的解释.Berry 相位是量子力学态矢的矢量纤维丛上的异和乐(anholonomy).

(4) Berry 相位通称为"量子几何相位",Berry 原先导出的相位是绝热几何相位.Anaronov - Anandan 导出的是一般非绝热循回过程的几何相位.Berry 强调这个相位叫几何相位.因为这个相位只被参数 $\lambda(\lambda_1,\lambda_2\cdots\lambda_i\cdots)$ 的路径几何(闭合回路 C 的几何因素)决定,而与 λ 在此路径上变化的速度 $\left|\frac{\partial\lambda}{\partial t}\right|$ 无关.

以二能级系统为例,实际上几何相位只与 C 所张开的立体角大小有关,曲线的形状也不重要,也可以说只与 C 的拓扑不变量有关.C 所张角度必须参照某个顶点为原点.这原点就是 λ 变化导致的二能级交叉点.是否存在几何相位,要看:(1)是否有 $E(\lambda)$ 能级交叉点,即"偶然简并"(accidental degeneracy).这种偶然简并性不是薛定谔方程所给出的,而是由 H 的性质决定的;(2) λ 变化在空间描绘的闭曲线,这不是薛定谔方程给出的,而是 λ 所体现的"环境"变化给定的.

(5) 由于 Berry 相位是依赖整个过程的量,而不是某个瞬时的量,因此有的文献上所谓"依赖时间的

Berry 相位”等类似说法是错误的.不存在含时的 Berry 相位.

(6) Berry 相位及其同族如 Aharonov - Anandan 相位,Aharonov - Casher 相位这一类型相位是势(Potential)(矢势或标量势)对波函数相位的影响.这个相位的产生不是由于互作用力场的作用结果.它们的定义是在粒子处于它所受到的总力场和力矩均为零的情况下,矢势或标量势对粒子波函数所起的作用.任何剩余的作用力或力矩都可以导致产生动力相位.这时的粒子波函数相位就会包含一部分受到力场贡献的动力学相位贡献,因此有的论文说 A - A,AC 几何相位包括了动力部分,这是错误的说法.Aharonov - Bohm 效应中电子的波函数沿不同路径的相位差,也就是电磁矢量势的结果,电子在整个路径不受任何电磁力的作用.这是属于几何相位的一族中的一种成员.现在这种势的作用被视为电子运动所在区域的拓扑结构的结果,因而是属于几何性质的效果.所以物理学一般接受这一族类的相位,并称之为量子几何相位.这是相位的产生与哈密顿所给予的互作用力场无关.

量子力学的一切结果都是量子态随时间演化必须满足薛定谔方程,这是当然的,因为薛定谔方程是量子系统的运动方程,不是特定的 Berry 相位为然.问题是 Berry 相位在波函数满足薛定谔方程这一个条件下,是否足够逻辑一致(self - consistent)地被定义.Aharonov - Bohm 效应争论了 30 多年,总不能说这个 AB 相位的出现是来自这个演化过程波函数必须满足薛定谔方程的结果.我们着重指出:量子几何相位的不可积性不是一个观点问题,而是一个物理上有明确意义的问题.相位不可积性是贝里相位的关键之处.把一般的可积相位认作是贝里相位是严重的物理错误.我们本来已在另一本专门著作(见李华钟.简单物理系统的整体性——贝里相位及其他.上海科技出版社,1998)中指出过,必须认清这一不可积性.关于几何相位的物理性质不同于动力学相位也是物理上的问题,也是不可混淆的.两者的区别是实验上可以区分的.

本文只讨论了不可积相位,因为一般大学物理系毕业生对它还不了解.至于可积的相位应该说一般比较熟悉.近代物理许多重要发展也是与可积相位有关,不过这需要另作专门讨论了.

作者简介

李华钟,男.现为中山大学物理系及高等学术研究中心教授、博士生导师.主要研究领域为:规范场理论、粒子理论、介观物理理论.发表科学论文 70 余篇,出版专著一部(《简单物理系统整体性——贝里相位及其他》),出版教材一部(《理论物理导论(主编),力学及热物理卷》).曾获国家自然科学三等奖,全国科学大会奖,教育部国家教委级科技进步奖,自然科学奖等二等奖共三次,广东省科技奖等.出国访问欧洲、美国、澳州、日本等十余个国家,访问了 40 余所大学及研究所,作学术报告 30 余次.

2001 年第 12 期《物理》内容预告