缓变参数量子力学体系演化的浸渐微扰理论及其对方势阱情况的应用

周玉龙[1)]　孙昌璞[2)]

(1)空军长春飞行学院物理教研室，长春 130022；2)东北师范大学物理系，长春 130024)

摘要 本文结合目前的进展介绍量子力学的一种微扰理论——浸渐微扰理论，它可用来处理具有缓变参数量子力学体系的演化问题．应用这个理论我们讨论了具有滑动阱壁无限深势阱中粒子的运动．

一、引言

在量子力学中，处理一般的具有含时哈密顿量量子体系的演化是十分困难的．但对于哈密顿量对时间依赖关系是小的、缓变的、或迅速的三种情况，一些近似方法被用来求解薛定谔方程．这些近似方法被分别称为含时微扰理论，浸渐近似(以前称绝热近似)方法和突发近似方法[1],[2]．前者是大家熟知的．本文将结合量子理论的最新进展，用量子力学教学中易于接受的方式介绍浸渐近似方法的发展，并应用这个方法讨论具有缓慢滑动阱壁无限深势阱中单粒子的运动．

需要指出的是，量子力学一建立，浸渐近似方法就诞生了[3]，但其推论中却包含了一个错误．1984 年英国 Bristol 大学的Berry 修正了这一错误，发现了今称为Berry 相因子的几何相因子[4]，形成了量子力学研究中一个重要的研究方向[5]．本文介绍的浸渐微扰理论[6] 考虑了 Berry 的修正，并强调了非浸渐效应的出现和浸渐条件．关于这个方法的评论和发展可参阅文献[7]．

二、浸渐微扰理论

设 $\hat{H}=\hat{H}(t)=\hat{H}(R(t))$是体系的哈密顿量，通常它通过一组参数 $R(t)=(R_1(t),R_2(t),\cdots R_n(t))$依赖于时间．对固定时间 t，设 $|n(t)\rangle=|n[R(t)]\rangle$ 和 $E_n(t)=E_n(R(t))$分别是 $\hat{H}(t)$的瞬时正交归一化本征函数和本征值，并假设为非简并的，即

$$\hat{H}(t)|n(t)\rangle=E_n(t)|n(t)\rangle \quad n=1,2,\cdots\ \Omega \tag{1}$$

为了近似求解含时薛定谔方程，我们设

$$|\psi(t)\rangle=\sum_{n=0}^{\Omega}C_n(t)e^{\frac{1}{i\hbar}\int_0^t E_n(\tau)d\tau}|n(t)\rangle \tag{2}$$

是(1)的解，代入(1)式并用$\langle m(t)|$左乘得到的方程两边，略作整理可得

$$\dot{C}_m(t)+C_m(t)\langle m(t)|\dot{m}(t)\rangle = -\sum_{n\neq m}e^{i\int_0^t\omega_{nm}(\tau)d\tau}C_n(t)\langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle=I_m \tag{3}$$

其中 $\omega_{nm}=\dfrac{E_n(t)-E_m(t)}{\hbar}$

从物理角度考虑，若 $\hat{H}(t)$不依赖于时间，则方程(1)完全可分离变量，其解(2)式中的 $C_n(t)=C_n(0)$是常数，$|m(t)\rangle$ 是常态矢，故方程(3)左端完全消失，当 $\hat{H}(t)$“稍稍”(以后给出定量描述)依赖于时间 t，(3)式的右端显然是个小量，可当作微扰，不妨设为 λI_m (λ 为微扰标度，计算后令为 1)并设

$$C_m(t)=\sum_{k=0}^{\infty}\lambda^k C_m^k(t) \tag{4}$$

代入(3)式，并比较 λ 的同次项系数得

λ^0 方项：$$\dot{C}_m^0(t)+\langle m(t)|\dot{m}(t)\rangle\tau_m^0(t)=0 \tag{5a}$$

λ^1 方项：$$\dot{C}_m^1(t)+\langle m(t)|\dot{m}(t)\rangle C_m^1(t)=-\sum_{n\neq m}C_n^0(t)\cdot e^{i\int_0^t\omega_{nm}(\tau)d\tau}\langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle=I_0(t,C_n^0(t)) \tag{5b}$$

………

λ^k 方项：$$\dot{C}_m^k(t)+\langle m(t)|\dot{m}(t)\rangle C_m^k(t)=-\sum_{n\neq m}C_n^{k-1}(t)\cdot e^{i\int_0^t\omega_{nm}(\tau)d\tau}\langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle=I_m(t,C_n^{k-1}(t)) \tag{5c}$$

由上述表达式可以看出，我们由初始条件(体系在 $t=0$ 时处于 $|\psi(0)\rangle$ 上)

$$C_n^0(0)=C_n(0)=\langle n(0)|\psi(0)\rangle,\ C_n^k(0)=0,\ k\geqslant 1$$

首先可求得

$$C_n^0(t)=C_n(0)\,e^{\,i v_n(t)} \tag{6}$$

其中 $v_n(t)=i\int_0^t\langle m(t')|\dot m(t')\rangle dt'$ 叫做Berry相位．由于 $C_m^1(t)$ 方程中只含 $C_m^0(t)\,(0\leqslant m\leqslant\Omega)\cdots$，$C_m^k(t)$ 的方程中只包含 $C_n^{k-1}\ (0\leqslant n\leqslant\Omega)$，则方程组可逐次求解，先由(5a)式求得 $C_n^0(t)$，然后代入(5b)式求得 $C_n^1(t)$ …，依次下去可得到各级解．$C_m^0(t), C_m^1(t)\cdots C_m^k(t)\cdots$，由此可得到近似的 $C_m(t)=C_m^0(t)+C_m^1(t)+C_m^2(t)+\cdots$，最后由(2)式确定波函数 $|\psi(t)\rangle$ 明显地由(5b)和(6)式得

$$C_m^1(t)=-e^{iv_m(t)}\sum_{n\neq m}\int_0^t e^{i\int_0^s\omega_{nm}(\tau)d\tau}e^{-iv_n(s)}\cdot\langle m(s)|\dot n(s)\,C_n^0(s)ds \tag{7a}$$

…………

$$C_m^k(t)=-e^{iv_m(t)}\sum_{n\neq m}\int_0^t e^{i\int_0^s\omega_{nm}(\tau)d\tau}e^{-iv_n(s)}\cdot\langle m(s)|\dot n(s)\,C_n^{k-1}(s)\,ds \tag{7b}$$

三、物理分析，浸渐条件与浸渐定理

在1984年以前的理论中，人们通常认为可以通过仅依赖于 t 的相位选择使得 $v_n(t)=0$(见 L.I 席夫的《量子力学》)，但许多问题中，这是行不通的．例如在磁场中自旋为 $\frac{1}{2}$ 粒子旋进的哈密顿量

$$\hat H(t)=gB(t)\cdot S=\frac{\hbar}{2}gB\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi(t)}\\ \sin\theta\, e^{i\varphi(t)} & -\cos\theta\end{bmatrix}$$

其中磁场 B 用极坐标表达为

$B=B(\sin\theta\cos\theta,\sin\theta\cos\varphi,\cos\theta)\ (\theta=\theta(t)\ \varphi=\varphi(t))$

且 $S=\frac{\hbar}{2}\sigma$，对应于本征值 $E_+=\frac{1}{2}gB\hbar$ 和 $E_-=-\frac{1}{2}gB\hbar$ 的 $\hat H(t)$ 的本征函数分别为

$$|\chi_+[B(t)]\rangle=\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{bmatrix},\ |\chi_-[B(t)]\rangle=\begin{bmatrix}-\sin\frac{\theta}{2}\\ \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{bmatrix}.$$

对应于 $|\chi_+[B(t)]\rangle$，Berry 相因子为

$$v_+(t)=-\int_0^t\frac{1}{2}[1-\cos\theta(\tau)]\dot\varphi(\tau)d\tau$$

特别是当 $\hat H(\tau)=\hat H(0)$ 时，即 $B(T)=B(0)$

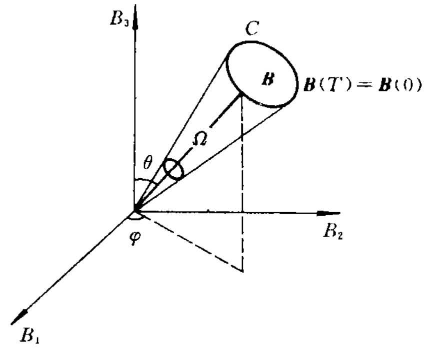
$$v_+(t)=-\frac{1}{2}\int_0^t(1-\cos\theta)d\varphi=-\frac{1}{2}\Omega(C)$$

$\Omega(C)$ 恰是 B 端路径 $C:\{B(t)|B(0)\rangle=B(T)\}$ 在参数空间（B_1、B_2、B_3）中对原点张成的立体角（如图所示）．在这个意义下 Berry 相因子称为几何相因子．

在这种情况下，虽然方程 $\hat H(t)|\chi_+(t)\rangle=E_+(t)|\chi_+(t)\rangle$ 的解可允许差一个相位，即 $|\chi_+(t)\rangle'=e^{i\theta(t)}|\chi_+(t)\rangle$ 仍为这个方程的解，但若使 $\langle\chi_+(t)|\dot\chi(t)\rangle=0$ 则必存在 $\theta(t)=v_+(t)$，它是一个依赖于参数空间路径 C 的因子，而不只是 t 的函数．因此，一般地说来，$v_n(T)$ 是不可忽略的．近年作了许多实验成功地验证了 $v_n(T)$ 的存在，因此在正确的浸渐近似理论中和在高阶微扰情况中，必须考虑 $v_n(t)$ 的高级效应，当然如果 $|n(t)\rangle$ 为实的，且单值地依赖于参数 R，则 $\langle n(t)|n(t)\rangle=1$．于是微分得

$\langle\dot n(t)|n(t)\rangle+\langle n(t)|\dot n(t)\rangle=2\langle n(t)|\dot n(t)\rangle=0$

这种情形 Berry 相位消失，关于Berry 相位存在条件的详细讨论参见文献[8]．



现在我们分析零级近似解．

$$C_n(t)\approx C_n^0(t)=C_n^{(0)}e^{iv_n(t)}$$

$$|\psi(t)\rangle\approx\sum C_n(0)\exp\left[iv_n(t)+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t E_n(\tau)d\tau\right]|n(t)\rangle \tag{8}$$

成立的条件，事实上由(7a)式知若 $e^{i\int_0^s\omega_{nm}(\tau)d\tau}$ 是一个振荡很快的函数 $\langle m(t)|\dot n(t)\rangle C_n^0(t)$ 又是缓慢变化，则右端积分将趋近于零，通过分部积分可把这个条件定量地表达为

$$\left|\frac{\langle m(t)|\dot n(t)\rangle}{\omega_{nm}}\right|=\left|\frac{\langle m(t)|\sum\frac{\partial}{\partial R_i}|n(R(t))\dot R_i\rangle}{\omega_{mn}}\right|\ll 1 \tag{9}$$

这就是浸渐近似条件，即体系外参数的变化率 $\dot{R}_i(t)$ 与内部跃迁频率相比较小，可忽略一级以上的修正，只须使用解(8)．这时若 $|\psi(0)\rangle=|n(0)\rangle$，即 $t=0$ 时体系处于 $\hat{H}(0)$ 的第 n 个本征值上．

$$|\psi(t)\rangle=e^{i\nu_n(t)}e^{\frac{1}{i\hbar}\int_0^t E_n(\tau)d\tau}|n(t)\rangle \qquad (10)$$

是 $\hat{H}(t)$ 的第 n 个本征函数．这就是量子浸渐定理．但在过去的理论中错误地把几何相因子 $e^{i\nu_n(t)}$ 取为1，从而丧失了这个理论的许多有意义的物理内容．事实上，可通过量子干涉实验确定 $\nu_n(t)$ 到相差一个 $2k\pi$（k 为整数）．

四、浸渐微扰理论在无限深方势阱中的应用

设质量为 μ 的粒子在一个宽度 $a=a(t)$ 缓变的一维无限深势阱中运动．其哈密顿量的本征函数和本征值分别为

$$|n(t)\rangle=\sqrt{\frac{2}{a(t)}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a(t)}\right)$$

$$E_n(t)=\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2\mu a(t)} \qquad (11)$$

由于 $|n(t)\rangle$ 为实的．$\nu_n(t)=0$，因此可得

$$\langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle=-\frac{1}{2}\frac{\dot{a}(t)}{a(t)}\delta_{mn}+\frac{n\dot{a}(t)}{a(t)}\cdot\frac{(-1)^{m+n}}{m^2-n^2} \qquad (12)$$

由此我们得到

$$C_m^0(t)=C_m(0)$$

$$\dot{C}_m^1(t)=-\sum_{n\neq m}C_n^{(0)}e^{i\int_0^t\omega_{mn}(\tau)d\tau}\frac{2n^2\dot{a}(t)}{a(t)}\cdot\frac{(-1)^{m+n}}{m^2-n^2}$$

…………

设当 $t=0$ 时 $a(0)=L$，体系处于第 k 个能级上即

$$C_m^0(t)=C_m(0)=\delta_{mk}$$

则由浸渐条件

$$\left|\frac{2\dot{a}(t)a(t)\mu}{\hbar(m^2-n^2)^2\pi^2}\right|\ll 1 \qquad (13)$$

满足时，在 t 时刻体系将处于态

$$|\psi(t)\rangle=e^{\frac{1}{i\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'}|k(t)\rangle$$

上．然而当 $a(t)$ 变化足够快，且 $a(x)$ 较大、粒子质量足够小，这个条件将破坏，这时

$$|\psi(t)\rangle=e^{\frac{1}{i\hbar}\int_0^t E_k(t')dt'}|k(t)\rangle+\sum_{m\neq k}\frac{2k^2(-1)^{m+k}}{m^2-k^2}\cdot A_{mk}(t)|m(t)\rangle$$

其中 $A_m(t)=\int_0^t e^{i\int_0^t\omega_{mk}(t')dt'}\frac{\dot{a}(t)}{a(t)}dt$

令 $\sum_{m\neq k}\frac{2k^2(-1)^{m+k}}{m^2-k^2}A_{mk}(t)=\widetilde{C}_{mk}(t)$

则 $|\psi(t)=e^{\frac{1}{i\hbar}\int_0^t E_k(t')dt'}|k(t)\rangle+\widetilde{C}_{mk}(t)|m(t)\rangle$ (14)

波函数重新归一化得

$$|\psi(t)\rangle=\frac{1}{\sqrt{1+|\widetilde{C}_{mk}(t)|^2}}\left[e^{\int_0^t\frac{E_k(t')}{i\hbar}dt'}|k(t)\rangle+\widetilde{C}_{mk}(t)|m(t)\rangle\right. \qquad (15)$$

(15)式表明，当 $a(t)$ 变化较快时，粒子以一定的概率被激发到 $m\neq k$ 态上．

其概率为

$$P_m=\left|\frac{\sum_{m\neq k}\frac{2k^2(-1)^{m+k}}{m^2-k^2}A_{mk}^{(t)}}{\sqrt{1+\sum_{m\neq k}^{\Omega}|\widetilde{C}_{mk}(t)|^2}}\right|^2$$

特别是相对概率

$$\frac{P_m}{P_{m'}}=\left|\frac{\sum_{m\neq k}\frac{2k^2(-1)^{m+k}}{m^2-k^2}A_{mk}^{(t)}}{\sum_{m'\neq k}\frac{2k^2(-1)^{m'+k}}{m'^2-k^2}A_{m'k}^{(t)}}\right|^2$$

是完全确定的．

参考文献

[1] L．I 席夫．量子力学(中译本)．北京：人民教育出版社，1982．331～335．

[2] D．玻姆．量子理论(中译本)．北京：商务印书馆，1982．602～612．

[3] M．Born and V．Fock，Z．Phys．51 (1928) 265．

[4] M．V．Berry，Proc．R．Lond．A 392 (1984) 45．

[5] A．Shapere and F．Wilczek，Geometric Phase in Physics，World．Scientific．1989．

[6] C．P．Sun (孙昌璞)，J．Phys．A 21 (1988) 1595；Phys．Rev．D 38 (1988) 2908；Phys．Rev．D 41 (1990) 1349．

[7] S．I．Vinitskii et．al．，Sov．Phys．Usp．33 (1990) 403．

[8] 孙昌璞，张林芝．高能物理与核物理，1990，14：136．