周期量子系统中状态演化的 Bloch 定理和一种新的量子相位*

李伯臧
（中国科学院物理研究所，北京 100080）
阎凤利
（河北师范大学物理系，石家庄 050016）
吴建华
（北京大学物理系，北京 100871）
梁九卿
（山西大学理论物理研究所，太原 030006）

摘要 在具有周期 Hamilton 量的量子系统中，含时 Schrodinger 方程存在相对于时间坐标的 Bloch 函数形式的解，它们构成解空间的正交归一基．据此可以定义一种新的量子相位．称为 Bloch 相位．这种相位是特殊的 Aharonov-Anandan 相位，并当瞬时本征能的简并度不随时间变化时，在绝热近似下化作 Berry 相位．对上述一般结论不仅做了论证，并以在匀角速旋进的磁场中的自旋磁矩为例作了具体计算．

关键词 周期量子系统 量子演化 量子相位 Bloch 定理 Bloch 相位

1984 年，Berry[1]研究了具有周期 Hamilton 量的绝热系统中状态随时间的演化特征，发现了几何相位（人们也称为 Berry 相位）．这是量子力学的一个重要进展，引起了许多理论的、实验的和数学的后继研究[2]，延续至今．1987 年 Aharonov 和 Anandan[3]提出了更广泛的一类量子相位（人们称之为 Aharonov-Anandan 相位，简称为 A-A 相位），它不涉及具体的 Hamilton 量，是一个纯粹的数学概念，Berry 相位为其特例．

本文仍然研究具有周期 Hamilton 量的量子系统，但不限于绝热情形，即 Hamilton 量随时间 t 的变化可以不是缓慢的，但它是周期的，即存在正的时间 τ，使

$$H(t+\tau)=H(t). \tag{1}$$

此处我们未明确写出 Hamilton 量对空间坐标（包括梯度算子）和自旋坐标的依赖性；下面对状态（波函数）也这么做．（1）式隐含其两端的空间-自旋坐标要一致．以后我们将满足（1）式的量子系统简称为周期量子系统．周期量子系统的实例是很多的，例如在随时间做周期变化势场中运动的定质量粒子，在周期外磁场中的自旋磁矩，即使质量随时间而变[4,5]，只要其变化是周期的且与势场变化周期相同，则变质量粒子也是一个周期量子系统．

我们发现：对于周期量子系统，含时 Schrodinger 方程（令 Planck 常数 $\hbar=1$）

$$\mathrm{i}\partial\psi(t)/\partial t=H(t)\psi(t) \tag{2}$$

具有对于时间坐标的Bloch函数形式的解，并且它们构成方程（2）的解空间的正交归一基，其

1996-01-22 收稿，1996-04-01 收修改稿
* 国家自然科学基金资助项目

个数与状态空间的维数相等. 根据上述结果可定义一种新的量子相位,称为 Bloch 相位,并证明它们是特殊的 A-A 相位(因与 $H(t)$有关),而且当瞬时本征能的简并度不随时间 t 而变化时,在绝热近似下化成 Berry 相位. 我们给出了求解 Bloch 函数形式的解的两种方法(Bloch 频率和 Bloch 相位可据此求得). 并以在匀角速旋进的磁场中的自旋磁矩为例,进行了具体计算.

1　Bloch 函数形式的解及其性质

将周期量子系统的状态(波函数)空间记为 Ω,它是一个 Hilbert 空间,以$\langle\cdot|\cdot\rangle$记其中的内积,将含时 Schrödinger 方程(2)的解空间记为 Ω_S. 在 Ω 中,时间 t 被视为参数;但在 Ω_S 中 t 表现为坐标(时间变量),故不应把 Ω_S 看成 Ω 的子空间. 但是,由于 Hamilton 量 $H(t)$是 Hermitian 的,故有

$$\partial\langle\psi(t)\mid\psi'(t)\rangle/\partial t=0;\quad\forall\,\psi(t),\psi'(t)\in\Omega_S. \tag{3}$$

亦即,当 $\psi(t)$和 $\psi'(t)\in\Omega_S$ 时,$\langle\psi(t)|\psi'(t)\rangle$ 与时间无关. 因此可将 Ω 中的$\langle\cdot|\cdot\rangle$取作 Ω_S 中的内积,使 Ω_S 相对于这个内积也成为 Hilbert 空间.

首先,我们证明

$$\dim\Omega_S=\dim\Omega\equiv N. \tag{4}$$

事实上,设 $\dim\Omega=N$(对于 s-自旋系统,$N=2s+1$;对粒子的轨道运动,$N=\infty$),则 Ω 中存在不含时的正交归一基 $\chi_m(m=1,2,\cdots,N)$. 令 $\mu_m(t)$是在初条件 $\mu_m(0)=\chi_m$ 下方程(2)的解,它可以形式地写成

$$\mu_m(t)=\left[T\exp\left(-\mathrm{i}\int_0^t H(t')\mathrm{d}t'\right)\right]\chi_m, \tag{5}$$

式中 T 为时间编序算符,而 $T\exp\left(-\mathrm{i}\int_0^t H(t')\mathrm{d}t'\right)$ 在量子力学教科书中常记为 $U(t,0)$,称为演化算符. 据(3)式知,对任何 t,都有

$$\langle\mu_m(t)\mid\mu_n(t)\rangle=\delta_{mn}. \tag{6}$$

另一方面,设 $\psi(t)$是方程(2)的解,则存在与时间无关的常数 $a_m(m=1,2,\cdots,N)$使

$$\psi(0)=\sum_{m=1}^N a_m\chi_m,$$

于是

$$\psi(t)=\left[T\exp\left(-\mathrm{i}\int_0^t H(t')\mathrm{d}t'\right)\right]\psi(0)=\sum_{m=1}^N a_m\mu_m(t). \tag{7}$$

(6)式和(7)式表明 $\mu_m(t)(m=1,2,\cdots,N)$是 Ω_S 中的正交归一基,从而(4)式成立.

其次,我们定义时间平移算符 K:

$$K\psi(t)=\psi(t+\tau), \tag{8}$$

则易见作为 Abel 群的时间平移群$\{K^n: n=0,\pm1,\pm2,\cdots\}$是 Ω_S 的对称群,故它在 Ω_S 中的表示可约化为一维(不可约)表示的直和. 设 $\psi_k(t)$是 Ω_S 中某个一维不可约表示子空间的态,则必存在实数 k(因为 K 显然是幺正的)使得

$$K\psi_k(t)=\psi_k(t+\tau)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\tau}\psi_k(t). \tag{9}$$

如果把 $\psi_k(t)$ 写成

$$\psi_k(t) = e^{ikt}u_k(t) \tag{10}$$

的形式，则 $u_k(t)$ 必然是 t 的周期函数，周期为 τ：

$$u_k(t+\tau) = u_k(t). \tag{11}$$

(10)式很像完整晶体中单电子能量本征函数，即 Bloch 函数[6~8]的形式，我们称之为方程(2)的 Bloch(函数形式的)解，而 k 称为相应的 Bloch 频率．由前面的讨论知道，有 $N=\dim\Omega=\dim\Omega_S$ 个互相正交的 Bloch 解；如果我们还将每个 Bloch 解归一化，则有

$$\langle\psi_k(t)\mid\psi_{k'}(t)\rangle = \langle u_k(t)\mid u_{k'}(t)\rangle = \delta_{kk'}. \tag{12}$$

于是 N 个 Bloch 解也构成 Ω_S 的正交归一基．

应当指出，若设 $\omega=2\pi/\tau$ 为 $H(t)$ 随时间变化的圆频率，则(10)式可改写为

$$\psi_k(t) = e^{i(k+n\omega)t}u_{k+n\omega}(t), \tag{13}$$

其中 n 为任意整数，$u_{k+n\omega}(t)=e^{-in\omega t}u_k(t)$ 仍是 t 的周期函数，周期亦为 τ．因此，我们必须把 k 与 $k+n\omega$ 视为同一，即 k 只能确定到 $\mathrm{mod}(\omega)$（$n\omega$ 类似于晶体的倒格矢）．

一个浅显的特例是 $H(t)=H$ 不含时的情形，此时 τ 为任意数，从而 u_k 应与 t 无关．将(10)式代入(2)式，知 $k=-E_n$，E_n 为 H 的本征值；而 $u_k=\phi_n$ 为 H 的属于 E_n 的本征函数．这是众所周知的结果．

2　一种新的量子相位——Bloch 相位

由(9)式可见，Bloch 解 $\psi_k(t)$ 在演化一周（即时间增加 τ）后，仅增加一个相因子．为确切起见，今后我们在时间间隔$[0,\tau]$中来讨论问题，于是(9)式可改写为

$$\psi_k(\tau) = e^{ik\tau}\psi_k(0). \tag{14}$$

我们称 $k\tau$ 为 $\psi_k(t)$（演化一周后）的总相位，但为了与 Berry 相位和 A-A 相位比较，我们将

$$\delta_k = k\tau + \int_0^\tau\langle\psi_k(t)\mid H(t)\mid\psi_k(t)\rangle dt = i\int_0^\tau\langle u_k(t)\mid\partial/\partial t\mid u_k(t)\rangle dt \tag{15}$$

取作 $\psi_k(t)$ 的相位，并称之为 $\psi_k(t)$ 的 Bloch 相位．注意这里的 $\psi_k(t)$（从而 $u_k(t)$）是归一化的，即满足(12)式．

容易看出，如果 $H(t)$ 的每个瞬时能级 $E_n(t)$ 在任何时刻都不简并（即 Berry[1]最早考虑的情形），则在绝热近似下[9,10]，Bloch 相位等于 Berry 相位．事实上，以 $\phi_n(t)$ 记与 $E_n(t)$ 对应的归一化瞬时能量本征函数

$$H(t)\phi_n(t) = E_n(t)\phi_n(t);\quad n = 1,2,\cdots,N. \tag{16}$$

$E_n(t+\tau)=E_n(t)$ 具有周期性，同样可将 $\phi_n(t)$ 取得有周期性[1,9]，Berry 证明，从 $\phi_n(0)$ 出发的量子态 $\psi_n(t)$ 按

$$\psi_n(t) = e^{i[d_n(t)+\gamma_n(t)]}\phi_n(t) \tag{17}$$

演化，其中

$$\begin{aligned} d_n(t) &= -\int_0^t\langle\phi_n(t')\mid H(t')\mid\phi_n(t')\rangle dt' = -\int_0^t E_n(t')dt', \\ \gamma_n(t) &= i\int_0^t\langle\phi_n(t')\mid\partial/\partial t'\mid\phi_n(t')\rangle dt', \end{aligned} \tag{18}$$

而 $d_n \equiv d_n(\tau)$ 和 $\gamma_n \equiv \gamma_n(\tau)$ 分别称为 $\psi_n(t)$ 的动力学相位和 Berry 相位. 由于 $E_n(t)$ 和 $\phi_n(t)$ 是周期的,故从(17)式得

$$K\psi_n(t) = \psi_n(t+\tau) = e^{i(d_n+\gamma_n)}\psi_n(t). \tag{19}$$

比较(9)式和(19)式,知 $\psi_n(t)$ 本身就具有 Bloch 函数形式. 为看清楚这一点,我们令

$$\begin{aligned} k_n &= (d_n+\gamma_n)/\tau; \quad \psi_{k_n}(t) = \psi_n(t), \\ u_{k_n}(t) &= \exp\left\{i\left[d_n(t) - \frac{t}{\tau}d_n + \gamma_n(t) - \frac{t}{\tau}\gamma_n\right]\right\}\phi_n(t). \end{aligned} \tag{20}$$

不难知 k_n 为实数,而 $u_{k_n}(t)$ 是 t 的周期函数. 于是(17)式可改写为类似于(10)式的形式:

$$\psi_{k_n}(t) = e^{ik_n t}u_{k_n}(t). \tag{21}$$

因此,与 $\psi_{k_n}(t)$ 相对应的 Bolch 相位 δ_{k_n} 就等于 Berry 相位 γ_n:

$$\delta_{k_n} = \gamma_n; \quad n = 1, 2, \cdots, N. \tag{22}$$

由于只应当有 N 个不同的 Bloch 频率,故上式($n=1,2,\cdots,N$)穷尽了所有的 Bloch 相位.

现在考虑 $E_n(t)$ 有简并的情形,并假定其简并度 g_n 不随时间而变. 在 $E_n(t)$ 的瞬时本征子空间中任选 g_n 个正交归一的态 $\varphi_{n1}(t), \varphi_{n2}(t), \cdots, \varphi_{ng_n}(t)$ 构成列矢量

$$\boldsymbol{\Phi}_n(t) = (\phi_{n1}(t), \phi_{n2}(t), \cdots, \phi_{ng_n}(t))^{\mathrm{T}}, \tag{23}$$

式中上角标 T 表示转置. 再定义列矢量

$$\boldsymbol{a} = (a_1, a_2, \cdots, a_{g_n})^{\mathrm{T}}, \tag{24}$$

其每个分量都是与 t 无关的 c-数. 在文献[9]和[11]中已经证明:在绝热近似下,从 $\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\Phi}_n(0)$ 出发的状态按

$$\psi(t) = e^{id_n(t)}[U^{(n)}(t)\boldsymbol{a}]\cdot\boldsymbol{\Phi}_n(t) \tag{25}$$

演化,此处 $d_n(t)$ 由(18)式第一行定义,而 $U^{(n)}(t)$ 是 $g_n\times g_n$ 的幺正矩阵.

从泛函分析[12]知,任何 $n\times n$ 的幺正矩阵均存在 n 个正交归一的本征矢量,相应的本征值均为幺模复数. 于是我们设 $\boldsymbol{a}_p$ 为 $U^{(n)}(\tau)$ 的正交归一本征矢量,相应的本征值为 $e^{i\epsilon_{np}}$,此处 ϵ_{np} 为实数($p=1,2,\cdots,g_n$). 令

$$\psi_{np}(t) = e^{id_n(t)}[U^{(n)}(t)\boldsymbol{a}_p]\cdot\boldsymbol{\Phi}_n(t), \tag{26}$$

它们当然也是方程(2)的绝热近似解,利用 $\boldsymbol{\Phi}_n(t)$ 的周期性以及

$$U^{(n)}(t+\tau) = U^{(n)}(t)U^{(n)}(\tau), \tag{27}$$

易得

$$K\psi_{np}(t) = \psi_{np}(t+\tau) = e^{i(d_n+\epsilon_{np})}\psi_{np}(t). \tag{28}$$

式中 $d_n = d_n(\tau)$ 是动力学相位. 据上式我们可将 ϵ_{np} 称为 Berry 相位.

比较(28)与(7)式,知(26)式的 $\psi_{np}(t)$ 亦具有 Bloch 函数形式,其中

$$\begin{aligned} k &= (d_n+\epsilon_{np})/\tau, \\ u_k(t) &= \exp\left\{i\left[d_n(t) - \frac{t}{\tau}d_n - \frac{t}{\tau}\epsilon_{np}\right]\right\}[U^{(n)}(t)\boldsymbol{a}_p]\cdot\boldsymbol{\Phi}_n(t). \end{aligned} \tag{29}$$

容易看出,当 $E_n(t)$ 无简并时(p 只取 1),ϵ_{np} 和 $U^{(n)}(t)\boldsymbol{a}_p\cdot\boldsymbol{\Phi}_n(t)$ 分别化作前面的 γ_n 和 $e^{i\gamma_n(t)}\phi_n(t)$.

可见,在绝热近似下,无论 $E_n(t)$ 有无简并(但有简并时,要求简并度不随时间而变),$k\tau$ 都等于动力学相位与 Berry 相位之和,而 $u_k(t)$ 成为 $H(t)$ 的瞬时本征函数.

同样不难证明,Bloch 相位是特殊的 A-A 相位(因为前者依赖于 Hamilton 量 $H(t)$,而后者是一个纯数学概念).为此,下面先用比 A-A 的原文[3]简化得多的方式来重述 A-A 相位的定义.考虑一个量子系统的态空间,仍记为 Ω,且仍在时间间隔 $[0,\tau]$ 内来讨论问题.如果 $\psi(t)\in\Omega$ 满足 $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle=1$, $\forall t\in[0,\tau]$ 和 $\psi(\tau)=e^{ib_\psi}\psi(0)$,则称为一个准周期曲线(QCC).此处 b_ψ 为实数,叫做 $\psi(t)$ 的相位,它可能依赖于 $\psi(t)$. $b_\psi=0$ 即 $\psi(\tau)=\psi(0)$ 的 QCC 称为周期曲线(CC).两个 QCC, $\psi(t)$ 和 $\phi(t)$,若存在 t 的实函数 $f(t)$ 使 $\psi(t)=e^{if(t)}\phi(t)$,则称它们是等价的 QCC,显然此等价是集合论[13]意义下的等价关系,于是可据此把由所有 QCC 构成的集合划分为一些等价类.显然,这样的等价类与文献[3]中投影空间里的闭合曲线是一一对应的.另外易证:在 QCC 的每个等价类中存在 CC 代表,记为 $\psi_c(t)$.定义

$$\beta_{[\psi]}=i\int_0^\tau\langle\psi_c(t)|\partial/\partial(t)|\psi_c(t)\rangle dt. \tag{30}$$

显然它是实数,且仅与类 $[\psi]$ 有关.即给定 QCC 的类后,$\beta_{[\psi]}$ 与类的 CC 代表选择无关.我们称 $\beta_{[\psi]}$ 为该类 $[\psi]$ 的 A-A 相位.此外,若对 QCC $\psi(t)$ 存在 Hamilton 量 H_ψ 使得方程

$$i\partial\psi(t)/\partial t=H_\psi\psi(t) \tag{31}$$

成立,则必有

$$b_\psi+\int_0^\tau\langle\psi(t)|H_\psi(t)|\psi(t)\rangle dt=\beta_{[\psi]}. \tag{32}$$

显然,每个 Bloch 解 $\psi_k(t)=e^{ikt}u_k(t)$ 都是一个 QCC, $u_k(t)$ 是与它等价的 CC.而且由(12)式知,不同的 Bloch 解所在的类是不同的.于是对任意的 k,均有

$$\delta_k=\beta_{[\psi_k]}. \tag{33}$$

3　求 Bloch 解的两种方案

下面给出两种求 Bloch 解的方案.

第 1 种为:

假定(5)式的 N 个 $\mu_m(t)$ 已经求出(例如可用不变量方法[14,15]来求),则可将 Bloch 函数 $\psi_k(t)$ 用 $\mu_m(t)$ 展开:

$$\psi_k(t)=\sum_{m=1}^N a_m\mu_m(t), \tag{34}$$

展开系数 a_m 与 t 无关(见(7)式).将上式代入(9)式,并利用(6)式,得到久期方程

$$\sum_{m=1}^N(M_{nm}-e^{ik\tau}\delta_{nm})a_m=0;$$

$$n=1,2,\cdots,N, \tag{35}$$

其中

$$M_{nm}=\langle\mu_n(t)|\mu_m(t+\tau)\rangle, \tag{36}$$

它们是与 t 无关的复数,见(3)式.

据方程(35)可将 $e^{ik\tau}$(从而 k)作为本征值解出,而相应的 a_m 也可求得,从而得到 $\psi_k(t)=$

$e^{ik\tau}u_k(t)$，而 $u_k(t) = e^{-ikt}\sum_{m=1}^{N} a_m\mu_m(t)$.

第 2 种方案为：

对 $H(t)$和 $u_k(t)$做 Fourier 展开：

$$H(t) = \sum_n H_n e^{in\omega t}; \quad u_k(t) = \sum_n \nu_{kn} e^{in\omega t}, \tag{37}$$

其中 $\omega = 2\pi/\tau$，$H(t)$的 Hermit 性要求 $H_n^\dagger = H_{-n}$. (37)式代入方程(2)，得到下列线性齐次方程

$$(k + n\omega)\nu_{kn} + \sum_{p+q=n} H_p\nu_{kq} = 0; \quad n = 1, 2, \cdots, \tag{38}$$

从它可以作为本征值问题解出 k 及相应的 ν_{kn}.

4 计算例：在匀角速旋进的磁场中的 s-自旋磁矩的演化

设磁场(实际上是与磁场成比例且与之反向的量，具有能量量纲)

$$\begin{aligned} B_x &= B\sin\theta\cos\phi; \\ B_y &= B\sin\theta\sin\phi; \\ B_z &= B\cos\theta \end{aligned} \tag{39}$$

做匀角速旋进：

$$B = \text{const.}, \ B > 0; \ \theta = \text{const.}, 0 < \theta < \pi; \phi = \omega t, \tag{40}$$

其中 $\omega = 2\pi/\tau$ 为磁场的旋进圆频率，τ 为周期.

首先考虑 1/2-自旋. 这时 Hamilton 量为

$$H(t) = \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\sigma} = B\begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\omega t} \\ \sin\theta e^{i\omega t} & -\cos\theta \end{bmatrix}, \tag{41}$$

此处 $\boldsymbol{\sigma}$ 是 Pauli 矩阵.

按第 3 节的第 1 种方案，先求方程(2)的一组正交归一解. 为此令

$$\psi(t) = (\alpha(t), \beta(t)e^{i\omega t})^{\mathrm{T}}. \tag{42}$$

(42)式代入(2)式，得

$$i\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix} = B\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & \omega/B - \cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix}. \tag{43}$$

这是一个常系数一阶线性微分方程，其一般解可设为 $(\alpha, \beta)^{\mathrm{T}} = e^{ikt}(\alpha_k, \beta_k)^{\mathrm{T}}$，其中 k，α_k 和 β_k 为与 t 无关的数. 上述一般解代入(43)式，得线性齐次方程组

$$\begin{aligned} (k + B\cos\theta)\alpha_k + (B\sin\theta)\beta_k &= 0, \\ (B\sin\theta)\alpha_k + (k + \omega - B\cos\theta)\beta_k &= 0. \end{aligned} \tag{44}$$

据此可解得两个 Bloch 频率 k，记为 $k_\pm$，及相应的 Bloch 解 $\psi_{k_\pm}(t)$：

$$k_\pm = [-\omega \pm (\omega^2 - 4\omega B\cos\theta + 4B^2)^{1/2}]/2, \tag{45}$$

$$\psi_{k_\pm}(t) = e^{ik_\pm t}(\alpha_{k_\pm}, \beta_{k_\pm}e^{i\omega t})^{\mathrm{T}}, \tag{46}$$

其中

$$\alpha_{k_\pm} = \sqrt{2}B\sin\theta[\omega^2 - 4\omega B\cos\theta + 4B^2 \mp (\omega - 2B\cos\theta)(\omega^2 - 4\omega B\cos\theta + 4B^2)^{1/2}]^{-1/2},$$

$$\beta_{k_\pm} = \alpha_{k_\pm}(2B\sin\theta)^{-1}[\omega - 2B\cos\theta \mp (\omega^2 - 4\omega B\cos\theta + 4B^2)^{1/2})]. \tag{47}$$

如果采用第 3 节第 2 种方案,以 $H(t) = H_{-1}e^{-i\omega t} + H_0 + H_1 e^{i\omega t}$,

$$H_{-1} = B\sin\theta\begin{pmatrix}0 & 1\\0 & 0\end{pmatrix}, H_0 = B\cos\theta\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}, H_1 = B\sin\theta\begin{pmatrix}0 & 0\\1 & 0\end{pmatrix}, \tag{48}$$

和 $\nu_{k,n} = (\nu_{k,n}^{\uparrow}, \nu_{k,n}^{\downarrow})^{\mathrm{T}}$ 代入(38)式,得到

$$\nu_{k,0}^{\downarrow} = \nu_{k,1}^{\uparrow} = \nu_{k,n}^{\downarrow} = \nu_{k,n}^{\uparrow} = 0. \quad n \neq 0, 1, \tag{49}$$

而 k, $\nu_{k,0}^{\uparrow}$和 $\nu_{k,1}^{\downarrow}$满足下列线性齐次方程:

$$\begin{aligned}&(k + B\cos\theta)\nu_{k,0}^{\uparrow} + (B\sin\theta)\nu_{k,1}^{\downarrow} = 0,\\&(B\sin\theta)\nu_{k,0}^{\uparrow} + (k + \omega - B\cos\theta)\nu_{k,1}^{\downarrow} = 0.\end{aligned} \tag{50}$$

它与(44)式完全相同,从而可解得(45)和(46)式.

其次考虑 1-自旋,Hamilton 量为

$$H(t) = \sqrt{2}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{s} = B\begin{bmatrix}\sqrt{2}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\omega t} & 0\\\sin\theta e^{i\omega t} & 0 & \sin\theta e^{-i\omega t}\\0 & \sin\theta e^{i\omega t} & -\sqrt{2}\cos\theta\end{bmatrix}, \tag{51}$$

其中 $\boldsymbol{s}$ 为无量纲的 1-自旋算符[16]. 按第 1 种方案,可直接设 Bloch 解为 $\psi_k(t) = e^{ikt}(\alpha_k, \beta_k e^{i\omega t}, \gamma_k e^{2i\omega t})^{\mathrm{T}}$,其中 α_k 等为与时间无关的数. 代之入(2)式得

$$\begin{aligned}&(k + \sqrt{2}B\cos\theta)\alpha_k + (B\sin\theta)\beta_k = 0,\\&(B\sin\theta)\alpha_k + (k + \omega)\beta_k + (B\sin\theta)\gamma_k = 0,\\&(B\sin\theta)\beta_k + (k + 2\omega - \sqrt{2}B\cos\theta)\gamma_k = 0.\end{aligned} \tag{52}$$

由此可解出三个 Bloch 频率

$$\begin{aligned}&k_0 = -\omega,\\&k_\pm = -\omega \pm (\omega^2 - 2\sqrt{2}\omega B\cos\theta + 2B^2)^{1/2},\end{aligned} \tag{53}$$

以及相应的系数 α_{k_0}, $\alpha_{k_\pm}$ 等(略). 于是得到三个 Bloch 解

$$\begin{aligned}&\psi_{k_0}(t) = e^{ik_0 t}(\alpha_{k_0}, \beta_{k_0}e^{i\omega t}, \gamma_{k_0}e^{2i\omega t})^{\mathrm{T}},\\&\psi_{k_\pm}(t) = e^{ik_\pm t}(\alpha_{k_\pm}, \beta_{k_\pm}e^{i\omega t}, \gamma_{k_\pm}e^{2i\omega t})^{\mathrm{T}},\end{aligned} \tag{54}$$

按第 2 种方案,以 $H(t) = H_{-1}e^{-i\omega t} + H_0 + H_1 e^{i\omega t}$, $H_{-1} = H_1^{\dagger}$

$$\begin{aligned}&H_0 = \sqrt{2}B\cos\theta\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & -1\end{bmatrix},\\&H_1 = B\sin\theta\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{55}$$

和 $\nu_{k,n} = (\nu_{k,n}^{\uparrow}, \nu_{k,n}^{0}, \nu_{k,n}^{\downarrow})^{\mathrm{T}}$ 代入(38)式,得到

$$\begin{aligned}&\nu_{k,0}^{\downarrow} = \nu_{k,0}^{0} = \nu_{k,1}^{\downarrow} = \nu_{k,1}^{\uparrow} = \nu_{k,2}^{0} = \nu_{k,2}^{\uparrow} = 0,\\&\nu_{k,n}^{\downarrow} = \nu_{k,n}^{0} = \nu_{k,n}^{\uparrow} = 0,\\&n \neq 0, 1, 2.\end{aligned} \tag{56}$$

而 k, $\nu_{k,0}^{\uparrow}$, $\nu_{k,1}^{0}$ 和 $\nu_{k,2}^{\downarrow}$ 满足下列方程:

$$
\begin{aligned}
&(k+\sqrt{2}B\cos\theta)\nu_{k,0}^{\uparrow}+(B\sin\theta)\beta_{k,1}^{0}=0,\\
&(B\sin\theta)\nu_{k,0}^{\uparrow}+(k+\omega)\nu_{k,1}^{0}+(B\sin\theta)\nu_{k,2}^{\downarrow}=0,\\
&(B\sin\theta)\nu_{k,1}^{0}+(k+2\omega-\sqrt{2}B\cos\theta)\nu_{k,2}^{\downarrow}=0.
\end{aligned}
\tag{57}
$$

它与(52)式完全相同,从而可解得(53)和(54)式.

对于 $s>1$ 的 s-自旋,上述解法可直接推广,不再赘述.

5 结论和讨论

本文的主要结论是:对于周期量子系统($H(t+\tau)=H(t)$):

(1)含时 Schrodinger 方程 $\mathrm{i}\partial\psi/\partial t=H\psi$ 具有 Bloch(函数形式的)解

$$\psi_k(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kt}u_k(t);\quad \langle\psi_k(t)\mid\psi_k(t)\rangle=\langle u_k(t)\mid u_k(t)\rangle=1,$$

其中 k 为实数,称为 Bloch 频率,它们共有 $N=\dim\Omega=\dim\Omega_S$ 个(参见(4)). 此处 Ω 为量子系统的态空间,Ω_S 为含时 Schrodinger 方程的解空间;$u_k(t+\tau)=u_k(t)$.

(2)这 N 个 Bloch 函数构成 Ω_S 的正交归一基.

(3)对每个 Bloch 解 $\psi_k(t)$ 可定义一个 Bloch 相位 δ_k. Bloch 相位是特殊的 A-A 相位,与 $H(t)$ 有关;当 $H(t)$ 的瞬时本征值的简并度不随时间 t 变化时,在绝热近似下等于 Berry 相位.

(4)令 $\omega=2\pi/\tau$,则对于任意整数 n,应将 k 与 $k+n\omega$ 视为同一.

仿照能带论[6~8]的做法,我们将以上结论称为“周期量子系统中状态演化的 Bloch 定理”.

若 Bloch 解已求出,则用它做 Ω_S 的基,比用 $H(t)$ 的瞬时本征函数为基更好,这是因为:含时 Schrodinger 方程的一般解用前者展开时,展开系数与时间 t 无关,因而可由初条件决定;用后者展开则不然,见文献[1]和[9].

提出了2种求解 Bloch 解的方案,并以在匀角速旋进的磁场中的自旋磁矩为例进行了具体计算. 一般,用这两种方案去解决问题都非易事,对此我们还将另文讨论.

我们还对 A-A 相位的定义做了简化,它丝毫不影响 A-A 相位的实质和个数. 若周期量子系统的态空间是 N 维的,则 Bloch 相位只有 N 个,但 A-A 相位比 N 个多. 例如 $[u_{k_1}(t)+u_{k_2}(t)]/\sqrt{2}$ 和 $[u_{k_1}(t)+u_{k_2}(t)+u_{k_3}(t)]/\sqrt{3}$ 等是互不等价且不与任何 $u_{k_n}(t)$ $(n=1,2,\cdots,N)$ 等价的 CC,因此 QCC 类(从而 A-A 相位)的数目远比 N 大.

参考文献

1 Berry M V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. Proc Roy Soc London, 1984, A392:45

2 Shapere A, Wilczek F. eds. Geometric Phases in Physics. Singapore: World Sci Pub, 1989

3 Aharonov Y, Anandan J. Phase change during a cyclic quantum evolution. Phys Rev Lett, 1987, 58: 1593

4 Wei L F, Liang J Q, Li B Z. Gauge independence of Lewis-Riesenfeld phases. Nuovo Cimento, 1995, B110: 1357

5 高孝纯,许晶波,钱铁铮. 广义含时谐振子的精确解和 Berry 相因数. 物理学报. 1991, 40:25

6 Bloch F. Uber die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern. Z Physik, 1928, 52: 555

7 Callaway J. Quantum Theory of the Solid State. 2nd ed. Boston: Acad Press, 1991. 2~4

8 李正中. 固体理论. 北京:高等教育出版社,1985. 6~11
9 李伯臧,吴建华. 绝热定理表述的改进以及 Berry 相位和 Wilczek-Zee 算符导出的简化. 物理学报,1995, 44: 16~23
10 Messian A. Quantum Mechanics, Vol II. Amsterdam: North-Holland Pub, 1961. 744~761
11 Wilczek F. Zee A. Appearance of gauge structure in simple dynamic systems. Phys Rev Lett, 1984, 52:2 111
12 夏道行,吴卓人,严绍宗等. 实变函数论与泛函分析, 下册. 北京:人民教育出版社, 1979. 293,312
13 Kuratowski K, Mostowski A. Set Theory. Amsterdam: North-Holland Pub , 1976. 66~69
14 Lewis Jr H R. Riesenfeld W B. An exact quantum theory of the time-dependent harmonic oscillator and a charged particle in a time-dependent electromagnetic field. J Math Phys, 1969, 10:1 458
15 Kwon O, Kim Y. A generation of the Lewis invariant method. Phys Lett, 1992, A166:107
16 Rose M E. Elementary Theory of Angular Momentum. New York:John Wiley & Sons Pub, 1957. Chap 2.