

用算符分解方法计算非同 调谐振子几何相位及其推广*

安南¹⁾ 杨新娥

(天津大学理学院物理系 天津 300072)

摘要 将几何相位理论应用于非同调谐振子(isotonic oscillator 缩写为 IO)这类量子系统,运用算符分解方法计算了系统在二态体系的 Aharonov-Anandan 相位,推广至三态及多态体系,并讨论了 AA 相位更普遍的计算公式和变化规律.

关键词 Aharonov-Anandan 相位 非绝热演化 非谐振子

1 引言

1984 年, Berry^[1,2]发现,对一非简并量子系统,如果哈密顿量在某参数空间作绝热演化而形成一条闭合曲线,即该量子系统作周期性绝热演化时,当系统完成一周演化其哈密顿量回到原值,除了人们熟知的动力学相因子外,还出现了一个新的相因子.它由哈密顿量在参数空间里的演化路径的几何结构决定,称作几何相位因子,或 Berry 相因子.

Berry 相因子一经提出,就引起了人们的广泛注意,人们将几何相位系统的限制条件一一解除.其中最重要的推广由 Aharonov 和 Anandan^[3]提出,他们将 Berry 原来关于哈密顿量在参数空间的周期性演化用系统本身的演化构成一闭合回路所代替,放弃了绝热近似假定.有关 Aharonov-Anandan 相位(AA 相位)的计算,人们尝试了许多办法,其中 D. J. Moore 提出的算符分解方法^[4]避免了直接求解 Schrödinger 方程的繁琐,通过选择演化的循环初态,得到了更为简化的 AA 相位计算方法.

在本文第 2 节中将研究非同调谐振子的波函数和能谱方程,用算符分解方法计算出它的 AA 相位,并将结果从二态体系推广至三态和多态体系.在第

3 节中,将提出一种 AA 相位的更普遍的计算公式,并分析其适用范围和相应的变化规律.

2 非同调谐振子模型的 AA 相位

在物理学中,谐振子有着极其广泛的应用,然而大量的实际问题(如量子光学)是偏离谐振子模型而必须用非谐振子势来描述的,为此人们提出了一些非谐振子模型,其中影响较大研究较多的一种是含有平方反比项的非谐振子(非同调谐振子 isotonic oscillator 缩写为 IO),其势函数为

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{g}{2x^2}, \quad (1)$$

它可用来描述一维三原子体系^[5,6],文献[7]研究了 IO 的广义相干态,揭示出它有与众不同的特点.

这节研究非同调谐振子的 AA 相位.在计算中,势函数中的参数被写成 $g = l(l+1)$,其波函数及相应的能谱方程分别为^[8]

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = & \\ & \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} N_n \frac{(-n)_k}{k!(l+3/2)_k} x^{2k+l+1} e^{-\frac{x^2}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}(2n+l+3/2)t}, \\ & (x > 0), \end{aligned} \quad (2)$$

2004-07-12 收稿

*南开大学天津大学刘微应用数学中心资助

1) E-mail: annan@eyou.com

$$E_n = 2n + l + 3/2, (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (3)$$

采用 D. J. Moore 的算符分解方法^[4]计算 AA 相位. 考虑以 τ 为周期的哈密顿量 $H(t)$, 其演化算符 U 分解成 $U = Z e^{iMt}$ 的形式, 其中 Z 是以 τ 为周期的么正算符, M 是与时间无关的自伴随算符. M 的本征矢量 $\phi_\alpha(0)$ 是循环初态. 它们的 AA 相位由下式表

$$\gamma_\alpha = i \int_0^\tau \langle \phi_\alpha(0) | Z^* \dot{Z} | \phi_\alpha(0) \rangle dt. \quad (4)$$

满足算符分解条件的一组 Z 和 M 并不是惟一的, 可通过下列变换得到另一组等价的算符

$$Z' = Z e^{-2\pi i N t / \tau}, \quad (5)$$

$$M' = M + 2\pi N / \tau. \quad (6)$$

其中算符 N 是任意的, 它和 M 对易, 且它的所有本征值都是整数. 在通常情况下满足算符分解式的所有 Z 和 M 的选择都是等价的, 它们给出系统的所有循环初态, 且这些循环初态是完全相同的. 此时任选一组 Z 和 M 即可按 (4) 式计算系统的 AA 相位. 但是存在一种特殊情况, 即系统的演化周期 τ 为某一特定值时, M 的两个本征值之间相差了 $2\pi/\tau$ 的整数倍, 那么将存在一个 M' , 它有一简并的本征值. 这时系统将存在循环初态 $\phi(0)$, 它是 M' 的本征矢量, 但不是 M 的本征矢量. 因此, 若要计算 $\phi(0)$ 演化产生的 AA 相位, 必须用 M' 和与之相对应的 Z' 进行计算. 将 M 的两个本征值相差 $2\pi/\tau$ 的整数倍这种情况称为准简并.

对于不含时系统, 令 $Z = 1, M = -H$, 演化算符分解为 $U = e^{-iHt}$. 不含时系统的演化周期 τ 是任意的, 如果 τ 的选择没有引起上述准简并的情况, 由于 Z 是一常量, $Z^* \dot{Z} = 0$, 由 (4) 式可知系统所有循环初态的 AA 相位都为零, 只有当 τ 的选择引起了准简并的时候, 对于系统的某些循环初态, 其演化才有可能产生非零的 AA 相位.

下面将具体研究二态体系和三态体系.

对于二态体系, 基态 $|\varphi_0\rangle$ 和第一激发态 $|\varphi_1\rangle$ 分别是系统的哈密顿量的本征态, 由 (2), (3) 式可知

$$|\varphi_0\rangle = N_0 x^{l+1} e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad E_0 = l + 3/2, \quad (7)$$

$$|\varphi_1\rangle = N_1 x^{l+1} e^{-\frac{x^2}{2}} - \frac{N_1}{l+3/2} x^{l+3} e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad E_1 = l + 7/2. \quad (8)$$

选择

$$\tau = \frac{2\pi}{E_1 - E_0} = \pi, \quad (9)$$

使得 M 在 $|\varphi_0\rangle$ 和 $|\varphi_1\rangle$ 态上的两个本征值相差 $2\pi/\tau$ 的整数倍, 满足准简并条件. 它们的线性组合

$$|\psi(0)\rangle = C_0 |\varphi_0\rangle + C_1 |\varphi_1\rangle, \quad (10)$$

是系统的循环初态. 其中 C_0, C_1 为组合系数, 令其满足 $\sum_{j=0}^1 |C_j|^2 = 1$. 容易看出, $|\psi(0)\rangle$ 不是 M 的本征矢量. 由 (6) 式, 令算符 N 的对角元 $n_0 = 0, n_1 = 1$, 可将准简并情况下的 M 变换成 M' , 使 $|\psi(0)\rangle$ 是 M' 的本征矢量. 同时由 (5) 式,

$$Z'^* \dot{Z}' = -2\pi i N / \tau, \quad (11)$$

且

$$i \int_0^\tau Z'^* \dot{Z}' dt = 2\pi N, \quad (12)$$

将 (10), (12) 式代入 (4) 式可得系统循环初态 $|\psi(0)\rangle$ 的 AA 相位为

$$\gamma = 2\pi |C_1|^2. \quad (13)$$

如果令初态的组合系数为 $C_0 = \cos \frac{\theta}{2}, C_1 = \sin \frac{\theta}{2}$, 则 AA 相位也可以写成

$$\beta(\tau) = \pi(1 - \cos \theta). \quad (14)$$

将上面的计算用于三态体系, 考虑基态 $|\varphi_0\rangle$ 、第一激发态 $|\varphi_1\rangle$ 和第二激发态 $|\varphi_2\rangle$, 它们都是 H 的本征态, 对应的本征值分别为 E_0, E_1 和 E_2 . 与二态体系一样, 选择周期 $\tau = \pi$ 使 M 在 $|\varphi_0\rangle, |\varphi_1\rangle$ 和 $|\varphi_2\rangle$ 态上的本征值满足准简并条件, 则系统的循环初态

$$|\psi(0)\rangle = C_0 |\varphi_0\rangle + C_1 |\varphi_1\rangle + C_2 |\varphi_2\rangle, \quad (15)$$

有 AA 相位

$$\gamma = 2\pi (|C_1|^2 + |C_2|^2), \quad (16)$$

其中 C_0, C_1, C_2 为组合系数, 令其满足 $\sum_{j=0}^2 |C_j|^2 = 1$.

3 计算结果在任意多态体系中的推广

3.1 任意多态体系 AA 相位的计算

由上节的计算结果可以看出, 对于哈密顿量不含时的情况, 系统演化产生的 AA 相位与系统的定态波函数的具体形式无关, 因此可将上述非同调谐振子模型的 AA 相位计算方法推广至任意的多态体系.

考虑系统哈密顿量的本征函数 $|\varphi_0\rangle, |\varphi_1\rangle, \dots$,

$|\varphi_n\rangle$, 它们对应的本征值分别为 E_0, E_1, \dots, E_n . 选择周期 τ , 使 M 的本征值满足如下条件

$$\begin{cases} M|\varphi_0\rangle = -E_0|\varphi_0\rangle, \\ M|\varphi_m\rangle = -E_m|\varphi_m\rangle = -\left(E_0 + \frac{2a_m\pi}{\tau}\right)|\varphi_m\rangle, \\ (m=1, 2, \dots, n). \end{cases} \quad (17)$$

其中 a_m 为非零整数. 那么系统的循环初态

$$|\psi(0)\rangle = C_0|\varphi_0\rangle + C_1|\varphi_1\rangle + C_2|\varphi_2\rangle + \dots + C_n|\varphi_n\rangle, \quad (18)$$

将有一非零的 AA 相位. 其中 $C_0, C_1, C_2, \dots, C_n$ 为

组合系数, 令其满足 $\sum_{j=0}^n |C_j|^2 = 1$.

令 $a_1 = 1$, 要使方程 (17) 组有解, 必须使 $\frac{E_2 - E_0}{E_1 - E_0}, \frac{E_3 - E_0}{E_1 - E_0}, \dots, \frac{E_n - E_0}{E_1 - E_0}$ 均为非零整数, 即所有能级与基态能级的能量差都为第一激发态与基态能量差的整数倍. 则方程组 (17) 可解得

$$\begin{cases} a_m = \frac{E_m - E_0}{E_1 - E_0}, (m=1, 2, \dots, n), \\ \tau = \frac{2\pi}{E_1 - E_0}, \end{cases} \quad (19)$$

于是系统的循环初态 $|\psi(0)\rangle$ 的 AA 相位为

$$\gamma = 2\pi(a_1 |C_1|^2 + a_2 |C_2|^2 + \dots + a_n |C_n|^2) = 2\pi \sum_{i=1}^n \frac{E_i - E_0}{E_1 - E_0} |C_i|^2. \quad (20)$$

这就是任意多态体系 AA 相位的计算式.

3.2 AA 相位计算方法适用范围的讨论

在计算多态体系 AA 相位的过程中, 有一个对于系统能谱方程的限制, 即

$$\frac{E_i - E_0}{E_1 - E_0} = a_i, (a_i \text{ 为非零整数}; i=1, 2, 3, \dots, n), \quad (21)$$

因此在应用 (20) 式求系统 AA 相位时, 对某些哈密顿量不含时的量子系统, 有如下两种情况:

当系统其能级变化只由唯一的参数决定, 且能谱方程满足上述限制条件, 这些系统可用 (20) 式直接计算它们在多态情况下的 AA 相位. 例如, 线性谐振子、三维各向同性谐振子和平面转子等都属于这种情况.

一维线性谐振子, 其能量本征值满足 (21) 式的限制条件, 可以算出它在多态情况下的 AA 相位为

$$\gamma = 2\pi \sum_{j=1}^n j |C_j|^2, \text{ 其中 } C_j \text{ 为系统循环初态的展开}$$

系数, 满足 $\sum_{j=0}^n |C_j|^2 = 1$.

三维各向同性谐振子的能量本征值为 $E = (2n_r + l + 3/2)\hbar\omega$. 虽然它由两个参数决定, 但由于三维各向同性谐振子的特殊性质, 能级只依赖于径向量子数 n_r 和角量子数 l 的一种特殊组合, 即只依赖于 $N = 2n_r + l$. 因此能谱方程可写成 $E_N = (N + 3/2)\hbar\omega$, ($N=0, 1, 2, \dots$). 可认为它只由唯一的参数 N 决定. 能量本征值仍然满足限制条件 (21), 其多态情况下的 AA 相位与一维谐振子相似,

$$\gamma = 2\pi \sum_{j=1}^n j |C_j|^2.$$

平面转子的能量本征值 $E_n = n^2\hbar^2/2I$, ($n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$), 由唯一的参数 n 决定. 能级为二重简并, 这里只考虑 $n \geq 0$ 时的情况. 由于 $\frac{E_j - E_0}{E_1 - E_0} = j^2$, ($j=1, 2, 3, \dots, n$), 能量本征值满足限制条件 (21),

它的 AA 相位可表示成 $\gamma = 2\pi \sum_{j=1}^n j^2 |C_j|^2$.

某些量子系统的能级尽管依赖于两个以上的参数, 但它们在低能级跃迁时, 只有一个参数变化, 其他参数不变, 此时可认为决定能级变化的参数只有一个, 若能谱方程满足上述限制条件, 则对这些系统可用 (20) 式计算它们在低能级跃迁时的 AA 相位. 但在较高能级时, 这些量子系统由于能级变化依赖于 2 个以上的参数, 其 AA 相位的计算需要作相应的修改, 不能简单地套用 (20) 式直接求解.

以非球谐振子为例. 它的势函数为 $V(r) = r^2/2 + A/2r^2$, 能量本征值为 $E_{n_r, l} = 2n_r + \sqrt{1 + 4[l(l+1) + A]}/2 + 1$, ($n_r=0, 1, 2, \dots$). 非球谐振子在基态与第一激发态之间跃迁时, 参数 $l=0$, 只有 n_r 决定能级的变化, 且此时能谱方程满足限制条件 (21). 将基态能级 E_{00} 和第一激发态能级 E_{10} 代入 (20) 式可得非球谐振子在二态体系中的 AA 相位为 $\beta(\tau) = 2\pi |C_1|^2$.

对于非球谐振子, 第二激发态 $E_{11} = \sqrt{9 + 4A}/2 + 3$, 第三激发态 $E_{20} = \sqrt{1 + 4A}/2 + 5$, 可看出在较高能级跃迁时, 能级变化依赖于两参数 n_r 和 l . 此时我们不能将上述计算二态体系 AA 相位的方法推广至多态体系. 这种情况下多态体系的 AA 相位必须具体计算, 这将在其他地方进行讨论.

4 结论

本文从几何相位基本原理出发, 以 IO 非谐振子

为例,讨论了哈密顿量不含时系统在能级跃迁时,在二态和三态体系下的 AA 相位的计算,并将结果作进一步推广,得出了任意多态体系 AA 相位计算公式. 结果表明,对于哈密顿量不含时的情况,如果系统能级变化只由一个参数决定,则这类系统可用本文所推导的公式计算它们在二态,三态和多态情况下的 AA 相位. 如果能级变化由两个以上的参数决

定,但在低能级跃迁时,只有其中一个参数变化,本文提出的 AA 相位计算公式仍然适用. 但在较高能级时,这些量子系统由于能级含有 2 个以上的参数,在考虑多态系统时,其 AA 相位必须具体计算. 不含时量子系统演化产生的 AA 相位只依赖于各个定态的能量本征值,而与系统的定态波函数的具体形式无关.

参考文献 (References)

- 1 Berry M V. Proc. R. Soc., 1984, **A392**:45—57
- 2 Berry M V. J. Phys. A:Math. Gen., 1985, **18**:15—27
- 3 Aharonov Y, Anandan J. Phys. Rev. Lett., 1987, **20**:1593—1596
- 4 Moore D J. Phys. Rep., 1991, **1**:1—43
- 5 Galogero F. J. Math. Phys., 1969, **10**:2191—2196
- 6 Zhu D. J. Phys., 1987, **A20**:4331—4336
- 7 XU Zi-Wen. Acta Physica Sinica, 1996, **45**:1807—1811 (in Chinese)
(徐子■. 物理学报, 1996, **45**:1807—1811)
- 8 CHEN Chang-Yuan, LIU You-Wen. Acta Physica Sinica, 1998, **47**:
536—541 (in Chinese)
(陈昌远, 刘友文. 物理学报, 1998, **47**:536—541)

Calculation and Generalization of Non-Adiabatic Geometric Phase of Isotonic Oscillator with Operator Decomposition*

AN Nan¹⁾ YANG Xin-E

(Department of Physics, School of Science, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

Abstract Operator decomposition approach is used to calculate the non-adiabatic geometric phase of anharmonic oscillator. As an example we focus on the isotonic oscillator, a type of anharmonic oscillator. The Aharonov-Anandan phase is derived when we choose the ground state and the first excited state as cyclic initial states. Then we generalize our result by choosing three states or more states as cyclic initial states. Finally, we give a general formula of Aharonov-Anandan phase for time-independent systems and discuss its applicability.

Key words Aharonov-Anandan phase, non-adiabatic evolution, anharmonic oscillator

Received 12 July 2004

* Supported by LiuHui Center for Applied Mathematics, Nankai University & Tianjin University

1) E-mail: annan@eyou.com