AB 相位和 Berry 相位概念体系导出及几何意义探究

曾植 [1)†]

1)（中山大学物理学院，广州　510000）

从 AB 效应出发推导 AB 相位概念体系，用两种方式来推导 Berry 相位概念体系。通过研究微分几何中引入联络与曲率的方式，发现 Berry 矢势和 Abel 规范场具有联络的意义，能够描述量子态的平移。而 Berry 曲率和电磁场张量分别是参数空间和闵氏时空上的相位空间的曲率。

关键词：Berry 相位，Berry 曲率，AB 效应，参数空间

1　引言

阿哈罗诺夫-玻姆(Aharonov-Bohm, AB)效应是指一个粒子(如电子)在实空间运动，即使不直接受到电磁场的作用，在也会因为电磁场的存在而产生额外的相位变化，即 AB 相位(phase)。在这种情况下，即使经典力不直接作用在粒子上，粒子的波函数仍然会受到电磁场的影响。这种效应揭示了量子力学中的全局相位差对物理过程的重要性，尤其是在干涉现象中。

1984 年 Berry 研究了当量子系统的外部参数缓慢变化并在参数空间形成循环时能量本征态的绝热演化。在没有简并度的情况下，本征态在结束循环时回到自身，会出现相位差，称 Berry 相位。

Berry 相位有三个重要性质：(1)规范不变性。这使得 Berry 相位有物理意义，在早期可以通过电子衍射实验来观测到。(2)几何相位。可以将其写为参数空间中循环上的线积分，而不依赖于沿循环的实际变化率，这使得我们可以根据参数空间中的局部几何量来表达 Berry 相位。(3)其导出的 Berry 联络(connection)、Berry 曲率(curvature)与规范场论和微分几何有紧密的类似之处，这使得它延伸出一个美丽直观强大的概念体系。

2　AB 相位概念体系导出

如图 1 是电子双缝衍射实验装置。在双缝后面放置一个细长螺线管，当螺线管通以电流从而在管内产生磁场时，发现干涉条纹移动。此即 AB 效应，说明电磁矢势$\boldsymbol{A}$是具有物理实质的，可以影响电子波束相位从而使干涉条纹移动。现在在该图景下导出 AB 相位。

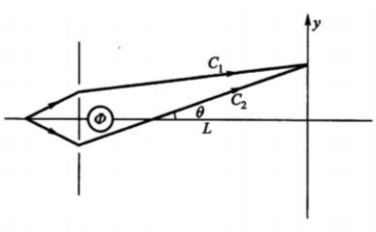

图 1　电子双缝衍射实验装置，螺线管壁超导绝磁

量子力学中，自由运动的电子态由平面波函数描述，略去归一化因子，波函数为[‡]

$$\psi_0(\boldsymbol{x}) = e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{1}$$

其中$\boldsymbol{p}$为电子机械动量。当螺线管不通电时，两束电子到达屏幕上同一点时，有相位差

$$\Delta\phi_0 = \int_{C_2} \boldsymbol{p_2}\cdot d\boldsymbol{l} - \int_{C_1} \boldsymbol{p_1}\cdot d\boldsymbol{l} = p\Delta l \tag{2}$$

其中Δl为两电子从出发到到达屏幕上同一点的路程差。

当螺线管通电时，电子波函数用正则动量$\boldsymbol{P}$描述

$$\psi(\boldsymbol{x}) = e^{i\int \boldsymbol{P}\cdot d\boldsymbol{l}} \tag{3}$$

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A} \tag{4}$$

两束电子相位差为

$$\begin{aligned}\Delta\phi &= \int_{C_2} \boldsymbol{P_2}\cdot d\boldsymbol{l} - \int_{C_1} \boldsymbol{P_1}\cdot d\boldsymbol{l} \\ &= \Delta\phi_0 + (-e)\oint_C \boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{l}\end{aligned} \tag{5}$$

式中C是由C_2和$-C_1$组成的闭合回路。

† 通讯作者.E-mail: zengzh63@mail2.sysu.edu.cn

‡ 本文使用自然单位制，即$c = \hbar = 1$

AB 相位即电磁矢势导致的相位差

$$\begin{aligned}\phi_{AB} &= -e\oint_C \boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{l}\\ &= -e\iint_S \nabla\times\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{S}\\ &= -e\iint_S \mathbf{B}\cdot d\boldsymbol{S}\\ &= -e\Phi \end{aligned}\tag{6}$$

Φ是通过此回路的磁通量，在图 1 中即螺线管内的磁通量。

由于量子效应，仅用$\boldsymbol{B}$来描述磁场是不够的，但是由于规范冗余性，用$\boldsymbol{A}$来描述磁场又是过多的。对实验的分析表明能够完全恰当地描述磁场的物理量是相因子

$$\exp\left[i(-e)\oint_C \boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{l}\right]\tag{7}$$

在相对论性$U(1)$规范场论中，这里就是个四维矢势 Wilson loop

$$W_q(C)=\exp\left[iq\oint_C A_\mu(x')\,dx'^\mu\right]\tag{8}$$

矢势沿闭合世界线走一圈，产生 AB 相位，对应在电磁相互作用下粒子绕闭合世界线一周多出来的相位。此时电磁场张量定义为

$$F_{\mu\nu}\equiv\frac{\hbar}{iq(dS)}\left(1-W_q(C)\right)\xrightarrow{S\to 0}\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu\tag{9}$$

其中$C=\partial S$为S边界。

3 Berry 相位概念体系导出

3.1 绝热近似条件

考虑一个由一些参数$R_\alpha, R_\beta, \ldots$决定的哈密顿量$H=H(\boldsymbol{R})$。为了方便表示，让这些参数组成一个向量：$\boldsymbol{R}=\left(R_\alpha, R_\beta, \ldots\right)$。这些参数具体是什么取决于我们所要研究的系统, 比如可以是布里渊区中的动量$\boldsymbol{k}$。我们假定它们都是随时间缓变的:$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{R}(t)$。这里的缓变有两层含义：

其一, 足够缓慢使得我们能在任意时刻都能找到所研究系统的哈密顿量$H\big(\boldsymbol{R}(t)\big)$的一系列正交完备本征态，有瞬时本征方程:

$$H\big(\boldsymbol{R}(t)\big)|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle=\varepsilon_n(\boldsymbol{R}(t))|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle\tag{10}$$

其二，足够缓慢使得绝热近似(adiabatic approximation)成立。即本征态随时间演化过程中不会跳至另一个本征态(不同的n)上。这里n用来标记本征态(类似于能带指标)。假设初始$\mathrm{t}=0$时系统处于态$|n(\boldsymbol{R}(0))\rangle$上，在t时刻的态$|\psi_n(t)\rangle$由$t$时刻的本征态$|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle$再乘上一个相因子构成:

$$|\psi_n(t)\rangle=e^{i\gamma_n(t)}e^{i\alpha_n(t)}\big|n\big(\boldsymbol{R}(t)\big)\big\rangle\tag{11}$$

$$\alpha_n(t)=-\int_0^t dt'\varepsilon_n\big(\boldsymbol{R}(t')\big)\tag{12}$$

这里我们把相位分解成了两部分, 第一部分γ_n是我们所要研究的。第二部分能量的积分项(12)称为动力学相位(dynamical phase)。把$|\psi_n(t)\rangle$代入薛定谔方程$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi_n(t)\rangle=H(\boldsymbol{R}(t))|\psi_n(t)\rangle$并左乘$\langle n(\boldsymbol{R}(t))|$，利用式(10)可以得到$\gamma_n$满足关系式:

$$\begin{aligned}\gamma_n(t)&=i\int_0^t dt'\left\langle n\big(\mathbf{R}(t')\big)\left|\frac{\partial}{\partial t'}\right|n\big(\mathbf{R}(t')\big)\right\rangle\\ &=i\int_{\mathbf{R}(0)}^{\mathbf{R}(t)}d\mathbf{R}\langle n(\mathbf{R})|\nabla_{\mathbf{R}}|n(\mathbf{R})\rangle\end{aligned}\tag{13}$$

最后一步把对时间的积分转化成了在参数空间上的积分。

假设系统的演化对应于参数空间$\boldsymbol{R}=\left(R_\alpha, R_\beta, \ldots\right)$上的一条路径，则相应的积分变为路径积分：

$$\gamma_n=\int_C d\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R})\tag{14}$$

其中引入了$\boldsymbol{R}$空间的矢势$\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R})=i\left\langle n(\boldsymbol{R})\left|\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}\right|n(\boldsymbol{R})\right\rangle$, 被称为 Berry 矢势或者 Berry 联络, 是一个矢量,维数取决于参数个数。注意 Berry 联络是规范依赖的，如果对采用的基做规范变换$|n(\boldsymbol{R})\rangle\to e^{i\zeta(\boldsymbol{R})}|n(\boldsymbol{R})\rangle$，那么 Berry 联络的变换和$\gamma_n$的改变量为

$$\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R})\to\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R})-\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}\zeta(\boldsymbol{R})\tag{15}$$

$$\zeta\big(\boldsymbol{R}(0)\big)-\zeta\big(\boldsymbol{R}(T)\big)\tag{16}$$

此时我们总可以选取一个规范使得新的γ_n是零。

1984 年 Berry 发现，如果哈密顿量在参数空间的演化是一个闭合回路，具有周期性，即

$$\boldsymbol{R}(T)=\boldsymbol{R}(0)\tag{17}$$

那么这时我们再做规范变换，要求$e^{i\zeta(\boldsymbol{R})}$是单值的，意味着$\zeta\big(\boldsymbol{R}(0)\big)-\zeta\big(\boldsymbol{R}(T)\big)$等于零或$2\pi$整数倍。这也就意味着$\gamma_n$在参数空间上的积分在模$2\pi$的意义下保持不

变。此即 Berry 相位

$$\gamma_n = \oint_C d\boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R}) \tag{18}$$

这是规范不变的。

类似于规范场论中由四维矢势A_μ构造出电磁场张量$F_{\mu\nu}$，我们也可以由 Berry 联络$A_n(\boldsymbol{R})$构造出对应的二阶反对称张量，其矩阵元为:

$$\Omega_{\mu\nu}^n(\boldsymbol{R}) = \frac{\partial}{\partial R^\mu} A_\nu^n(\boldsymbol{R}) - \frac{\partial}{\partial R^\nu} A_\mu^n(\boldsymbol{R}) \tag{19}$$

称为 Berry 曲率。那么(18)式又化为

$$\gamma_n = \iint_S d\boldsymbol{S} \cdot \left(\nabla \times \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R})\right) = \iint_S \boldsymbol{\Omega}^n(\boldsymbol{R}) \cdot d\boldsymbol{S} \tag{20}$$

这个 Berry 曲率就是引言中提到的可以用来描述 Berry 相位的参数空间中的局部几何量，

3.2 从定义导出

由上述结果我们知道 Berry 相位是一个矢量沿参数空间中的路径移动回到起点所产生的全局相位演化。现在从该视角导出其表达式。

定义参数空间中两个量子态的距离

$$D_{12}^2 \equiv -\ln|\langle\psi(\boldsymbol{R}_1) \mid \psi(\boldsymbol{R}_2)\rangle|^2 \tag{21}$$

记

$$\langle\psi(\boldsymbol{R}_1) \mid \psi(\boldsymbol{R}_2)\rangle = |\langle\psi(\boldsymbol{R}_1) \mid \psi(\boldsymbol{R}_2)\rangle| e^{i\Delta\varphi_{21}} \tag{22}$$

可推出

$$Im \ln\langle\psi_1 \mid \psi_2\rangle = \Delta\varphi_{21} = -\Delta\varphi_{12} \tag{23}$$

那么 Berry 相位写为

$$\begin{aligned} \gamma_c &= \Delta\varphi_{01} + \Delta\varphi_{12} + \cdots + \Delta\varphi_{N-1,N} \\ &= -\sum_{j=0}^{N-1} Im \ln\langle\psi(\boldsymbol{R}_j) \mid \psi(\boldsymbol{R}_{j+1})\rangle \\ &= -Im \oint d\boldsymbol{R}\, \langle\psi_{\boldsymbol{R}}|\partial_{\boldsymbol{R}}|\psi_{\boldsymbol{R}}\rangle \\ &= i \oint d\boldsymbol{R}\, \langle\psi_{\boldsymbol{R}}|\partial_{\boldsymbol{R}}|\psi_{\boldsymbol{R}}\rangle = \oint \boldsymbol{A} \cdot d\boldsymbol{R} \end{aligned} \tag{24}$$

其中第三个等号取连续参数，作两次一阶 Taylor 展开；第四个等号是由于$\langle\psi_{\boldsymbol{R}}|\partial_{\boldsymbol{R}}|\psi_{\boldsymbol{R}}\rangle$是纯虚数，对内积求导可证。注意，由于每个$|\psi(\boldsymbol{R}_j)\rangle$和它的复共轭在式(24)中成对出现，显然 Berry 相位是规范不变的。

$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})$和$\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{R})$的表达式同上，除此之外，还可以仿照 Riemann 空间中两点间距离与度规(metric)张量的关系，得出参数空间中的无穷小距离

$$D_{\boldsymbol{R},\boldsymbol{R}+d\boldsymbol{R}}^2 = g_{\alpha\beta}(\boldsymbol{R}) dR^\alpha dR^\beta \tag{25}$$

联合(21)式求出参数空间的度规为

$$g_{\alpha\beta}(\boldsymbol{R}) = Re\left\langle \psi_{\boldsymbol{R}_\alpha} \middle| (\mathbf{1} - |\psi_{\boldsymbol{R}}\rangle\langle\psi_{\boldsymbol{R}}|) \middle| \partial_{\boldsymbol{R}_\beta} \psi_{\boldsymbol{R}} \right\rangle \tag{26}$$

4 几何意义

由上述物理量的推导，我们可以看出两种相位概念体系是相似的。Berry 相位、联络和曲率相当于参数空间中的 AB 相位(磁通量)、电磁矢势和电磁场张量。比如，取参数为三维动量，那么这个 Berry 曲率会导致一个反常速度，类似动量空间中的磁场。

现在我们来考察它们与微分几何的联系，探究它们的几何意义。

微分几何中，张量定义在流形(manifold)上，但不能直接在流形上平移，因为流形是一个局部类似于欧几里得空间的抽象空间，但在整体上可能具有复杂的拓扑和几何结构。不同点处的切空间(tangent spaces)可能并不是直接相容的。我们可以通过平行输送(parallel transport)——保持某种平行性的同时，沿着给定曲线在流形上移动张量的过程——来作张量的平移，为此，我们引入联络$\Gamma_{\mu\nu}^\lambda$，无限小平移dx^ν导致的张量变化为

$$\delta A_\mu(P) = \Gamma_{\mu\nu}^\lambda(P) A_\lambda(P) dx^\nu \tag{27}$$

再通过张量的线性性质和协变性质作为约束条件来导出联络的表达式。

而在参数空间中，态的平移保持内积不变，

$$\langle\psi(\boldsymbol{R}_0) \mid \psi(\boldsymbol{R}_0)\rangle = \langle\psi(\boldsymbol{R}_1) \mid \psi(\boldsymbol{R}_1)\rangle \tag{28}$$

则

$$|\psi(\boldsymbol{R}_1)\rangle = e^{i\gamma}|\psi(\boldsymbol{R}_0)\rangle \tag{29}$$

γ为相位差，考虑无穷小平移$d\boldsymbol{R}$，作展开

$$|\psi(\boldsymbol{R}_1)\rangle = (1 + i\gamma)|\psi(\boldsymbol{R}_0)\rangle \tag{30}$$

得到

$$\delta|\psi(\boldsymbol{R}_0)\rangle = i\gamma|\psi(\boldsymbol{R}_0)\rangle = i\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}_0)|\psi(\boldsymbol{R}_0)\rangle d\boldsymbol{R} \tag{31}$$

对比(27)式，发现 Berry 矢势等价于一种联络，这也是 Berry 联络名称的由来。

另外还可以通过微分几何中的协变导数

$$T_{\mu;\nu} = T_{\mu,\nu} - \Gamma_{\mu\nu}^\lambda T_\lambda \tag{32}$$

与规范场论中协变导数

$$D_\mu\psi = (\partial_\mu - iA_\mu)\psi \tag{33}$$

对比来得到相应结论。

微分几何中有两种引入曲率的方式，一种方法是在联络形式的框架下，定义流形上的曲率张量，它是联络形式的外微分。另一种方法是通过矢量A^μ沿闭合路径平移后的增量来引入曲率张量，如

$$\delta A^\mu = -\frac{1}{2}R^\lambda_{\rho\mu\nu}A^\rho(dx^\mu\delta x^\nu - dx^\nu\delta x^\mu) \tag{34}$$

其中$R^\lambda_{\rho\mu\nu}$称曲率张量，描述流形的弯曲程度。

在上述两种意义下，都可以得出 Berry 曲率等价于参数空间的曲率，电磁场张量等价于闵氏时空的曲率。但是注意，以 Berry 曲率为例，并不能直接认为它是参数空间的曲率，因为微分几何中是流形上的张量进行平移而不是联络进行平移，参数空间中是联络进行平移，是量子力学下的矢量，故只将其等价。事实上，闵氏时空是平坦的，时空中的实矢量沿闭合路径移动不变化，其 Riemann 曲率为 0，一种更合适的说法是称电磁场张量为闵氏时空上的相位空间的曲率，Berry 曲率是参数空间上的相位空间的曲率，对应于四维矢势沿世界线闭合路径移动产生相位差，Berry 联络沿参数空间闭合路径移动产生相位差。

当然，作为曲率概念的等价，Berry 曲率与电磁场张量都是局域的(local)，这也是为什么在(9)式中要求$S \to 0$了。

5 总结与展望

我们对 AB 相位和 Berry 相位概念体系作了推导。从 AB 效应出发，逐步推出 AB 相位，即磁矢势导致的相位差，然后考虑了其在四维闵氏时空下的形式，写出 Wilson loop 和电磁场张量的表达式。对于 Berry 相位，写了两种推导方式，一个是从最原始的绝热演化条件出发，另一个是已知其物理图像直接从参数空间的量子态之间的相位出发，然后写出参数空间的 Berry 联络、Berry 曲率和度规。

接下来由于两种概念体系的相似与对名称的不解，我们进行了它们的几何意义探究。通过研究微分几何中引入联络与曲率的方式，发现 Berry 矢势和 Abel 规范场就具有联络的意义，能够描述量子态的平移。而 Berry 曲率是参数空间上的相位空间的曲率，能够描述 Berry 联络沿参数空间闭合路径移动产生的相位差；电磁场张量是闵氏时空上的相位空间的曲率，能够描述四维矢势沿世界线闭合路径移动产生的相位差。

关于 Berry 相位概念体系，现在我们知道 Berry 相位是量子态在参数空间中的全局几何性质，反映量子态在一定参数空间中的几何演化，Berry 曲率是量子态在参数空间中的局部几何特征，反映量子态随参数变化的响应。除此之外，还有大量已知或未知的知识等待我们去学习或研究，比如如果在一个闭合的曲面内，存在非零的 Berry 相位，则说明在这个闭合曲面内的磁通量不为零，也即对应的类磁场是一个有源场。而真实空间中，磁场是一个无源场，这也是为什么实空间中不存在磁单极子(monopole)。但非零 Berry 相位的存在，让我们相信磁单极子可以存在于参数空间中，而这导致了拓扑结构的改变，拓扑相变应运而生……

除此之外，文中几何意义的探究是并不严谨的，纤维丛，底流形、非局域性等量子场论和数学物理概念还有待学习。

展望未来，道阻且长。在论文的末尾致谢李志兵老师的淳淳教导与拔尖班各位同学的共寻真理！

参考文献

[1] TOMITA A, CHIAO R Y. Observation of Berry's Topological Phase by Use of an Optical Fiber [J]. Physical Review Letters, 1986, 57(8): 937-40.

[2] XIAO D, CHANG M-C, NIU Q. Berry phase effects on electronic properties [J]. Reviews of Modern Physics, 2010, 82(3): 1959-2007.

[3] 俞允强. 广义相对论引论 [M]. 北京大学出版社.

[4] 周世勋. 量子力学教程 [M]. 高等教育出版社.

[5] SHEN S-Q. Topological Insulators [M].

[6] 郭硕鸿. 电动力学 [M]. 高等教育出版社.