ein anderes Thema – Dr. M. Eschrig

1 Berry - Phasen

(Berry - Phasen)

langsam zeitabhängiger Hamilton Op. $\hat{=}$ adiabatisch

1.1 Adiabatische Variable

Betrachte ein Quantensystem unter Einfluss einer langsam veränderlichen Größe $\vec{\lambda}(t) = (\lambda_1(t), \lambda_2(t), \ldots$

Betrachte zeitabh. Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t,\vec{\lambda})\rangle + i\hbar \frac{\partial \vec{\lambda}}{\partial t} \underbrace{\frac{\partial}{\partial \vec{\lambda}}}_{\nabla_\lambda} |\Psi(t,\vec{\lambda})\rangle = H(\vec{\lambda}) |\Psi(t,\vec{\lambda})\rangle$$

$\frac{\partial \vec{\lambda}}{\partial t} = \dot{\vec{\lambda}}$ soll "hinreichend" klein sein

$\Rightarrow$ Fasse 2. Term als Störung auf und löse

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t,\vec{\lambda})\rangle = H(\vec{\lambda}) |\Psi(t,\vec{\lambda})\rangle$$

Fasse $\vec{\lambda}$ als Parameter auf und löse SGL für jedes feste $\vec{\lambda}$ (beliebig aber fest)

$$H(\vec{\lambda}) |\Psi_n(\vec{\lambda})\rangle = E_n(\vec{\lambda}) |\Psi_n(\vec{\lambda})\rangle$$

mit $\langle \Psi_n(\vec{\lambda}) | \Psi_m(\vec{\lambda})\rangle = \delta_{nm} \quad \forall \vec{\lambda}$

Diese Näherung kann man machen wegen

1.2 Adiabatisches Prinzip

$\vec{\lambda}_0 = \vec{\lambda}(t=0)$

Falls das Quantensystem im Zustand $|\Psi_n(\vec{\lambda}_0)\rangle$ startet, dann verbleibt das System im Zustand $|\Psi_n(\vec{\lambda})\rangle$ so lange kein Entartungspunkt in Abh. von $\vec{\lambda}$ auftaucht ($E_n(\vec{\lambda}) \neq E_m(\vec{\lambda})$ für $n \neq m$)

7.3 Dynamische und adiabatische Phasen

Betrachte Zeitentwicklung von $|\psi\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = c(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\, E_n(\vec\lambda'(t))\right)|\psi_n(\vec\lambda(t))\rangle$$

Einsetzen in zeitabh. SGL

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = i\hbar\,\dot c(t)\exp(\cdot\cdot)\,|\psi_n(\vec\lambda(t))\rangle \quad \Big| \quad \langle\psi_n(\vec\lambda(t))|\cdot$$

$$+\, c(t)\,E_n(\vec\lambda(t))\exp(\cdot\cdot)\,|\psi_n(\vec\lambda(t))\rangle$$

$$+\, c(t)\exp(\cdot\cdot)\frac{\partial}{\partial t}|\psi_n(\vec\lambda(t))\rangle = H\,c\exp()\,|\psi_n\rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar\,\dot c\exp(\cdot) + c\,E_n\cancel{\exp(\cdot\cdot)} + c\exp(\cdot)\langle\psi_n|\frac{\partial}{\partial t}|\psi_n\rangle = E_n\cancel{c\exp(\cdot)}$$

$$\Rightarrow \dot c(t) = -c(t)\,\langle\psi_n(\vec\lambda(t))|\frac{\partial}{\partial t}\psi_n(\vec\lambda(t))\rangle$$

Formale Lösung
$\Rightarrow$

$$c(t) = c(0)\exp\left(-\int_0^t \underbrace{\langle\psi(\vec\lambda(t'))|\frac{\partial}{\partial t}|\psi_n(\vec\lambda(t'))\rangle\, dt'}_{\langle\psi(\vec\lambda)|\nabla_\lambda\psi(\vec\lambda)\rangle\frac{d\vec\lambda}{dt}}\right.$$

$$c(t) = c(0)\exp\left(-\int_0^{\vec\lambda_t} d\vec\lambda\;\underbrace{\langle\psi_n(\vec\lambda)|\nabla_\lambda\psi_n(\vec\lambda)\rangle}_{\text{rein imaginär}}\right.$$

$$\langle\psi_n(\vec\lambda)|\psi_n(\vec\lambda)\rangle = 1$$

$$\Rightarrow \vec\nabla_\lambda\langle\psi_n(\vec\lambda)|\psi_n(\vec\lambda)\rangle = 0$$

$$\Leftrightarrow \langle\vec\nabla_\lambda\psi_n(\vec\lambda)|\psi_n(\vec\lambda)\rangle + \langle\psi_n(\vec\lambda)|\vec\nabla_\lambda\psi_n(\vec\lambda)\rangle = 0$$

$$\Rightarrow 2\,\mathrm{Re}\left(\langle\psi_n(\vec\lambda)|\vec\nabla_\lambda\psi_n(\vec\lambda)\rangle\right) = 0$$

$$c(t) = c(0)\exp\left(-i\,\mathrm{Im}\int_{\vec\lambda_0}^{\vec\lambda_t} d\vec\lambda\,\langle\psi_n(\vec\lambda)|\vec\nabla_\lambda\psi_n(\vec\lambda)\rangle\right.$$

$$= c(0)\, e^{i\gamma_n(\underbrace{C}_{\text{Kurve, die von } \vec\lambda \text{ durchlaufen wird (von } \vec\lambda_0 \text{ nach } \vec\lambda_t)})}$$

$$|\Psi(t_0)\rangle = |\psi_n(\lambda(t_0))\rangle$$

$$|\Psi(t)\rangle = \underbrace{e^{-i\gamma(C)}}_{\text{zusätzlicher Phasenfaktor}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(\vec\lambda(t'))\,dt'\right)|\psi_n(\vec\lambda(t))\rangle$$

Phase $\gamma_n(C)$ nennt man "Berry Phase"

1.4 Die Berry-Phase

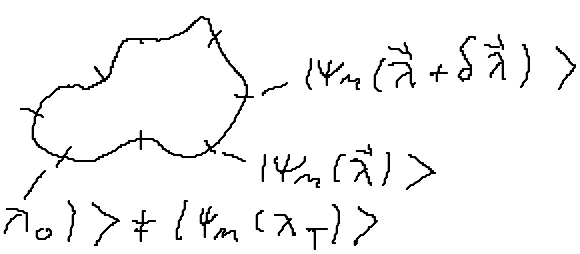
Betrachte $H(\vec\lambda)\,|\psi_n(\vec\lambda)\rangle = E_n(\vec\lambda)\,|\psi_n(\vec\lambda)\rangle$

Problem: $\psi_n(\vec\lambda)$ ist keine eindeutige Funktion von $\vec\lambda$, da eine Eichfreiheit besteht.

$$|\tilde\psi_n(\vec\lambda)\rangle = e^{i\alpha_n(\vec\lambda)}\,|\psi_n(\vec\lambda)\rangle$$

Sind diese Phasen relevant?

Betrachte geschlossene Kurve im "$\vec\lambda$-Raum"
(z.B. 2D-Raum)



infinitesimale Phasendifferenz $d\varphi_n$ zwischen $|\psi_n(\vec\lambda)\rangle$ und $|\psi(\vec\lambda+\delta\vec\lambda)\rangle$

$$d\varphi_n = \underset{\uparrow\ \text{argument}}{\arg}\left(\psi_n(\vec\lambda)|\psi_n(\vec\lambda+\delta\vec\lambda)\rangle\right)$$

$$= \operatorname{Im}\ln\langle\psi_n(\vec\lambda)|\psi_n(\vec\lambda+\delta\vec\lambda)\rangle$$

eichabhängige Größe

entwickeln:

$$d\varphi_n = \underline{\arg}\left(1 + \underbrace{\langle\psi_n(\vec\lambda)|\nabla_\lambda\,\psi_n(\vec\lambda)\,d\vec\lambda\rangle}_{\text{rein Imag}}\right)$$

$$= \operatorname{Im}\ln\Big(\qquad\qquad \Big)$$

$$\ln(1+\Delta) \approx \Delta$$

$$\Rightarrow \quad d\varphi_n = \mathrm{Im} \langle \psi_n(\vec{\lambda}) | \nabla_{\vec{\lambda}} \psi_n(\vec{\lambda}) \rangle \, d\vec{\lambda}$$

$$= -i \langle \psi_n(\vec{\lambda}) | \nabla_{\vec{\lambda}} \psi_n(\vec{\lambda}) \rangle$$

Annahme: kein Entartungspunkt auf Kurve $\mathcal{C}$

Betrachte totale Phase über Kurve $\mathcal{C}$

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \oint_{\mathcal{C}} d\varphi_n = \mathrm{Im} \oint_{\mathcal{C}} \langle \psi_n | \vec{\nabla}_{\lambda} \psi_n \rangle \, d\vec{\lambda}$$

Man kann dies schreiben als

$$\boxed{\gamma_n(\mathcal{C}) = \oint_{\mathcal{C}} \vec{C}_n(\vec{\lambda}) \, d\vec{\lambda} \quad \text{mit} \quad \vec{C}_n(\vec{\lambda}) = \mathrm{Im} \langle \psi_n(\vec{\lambda}) | \vec{\nabla}_{\lambda} \psi_n(\vec{\lambda}) \rangle}$$

Berry-"Vektorpotential"

"Berry-connection"

Beh. $\gamma_n(\mathcal{C})$ ist eichinvariant

Beweis:
$$\tilde{\vec{C}}_n(\vec{\lambda}) = \mathrm{Im} \langle \tilde{\psi}_n(\vec{\lambda}) | \vec{\nabla}_{\lambda} \tilde{\psi}_n(\vec{\lambda}) \rangle$$

$$= \mathrm{Im} \left[e^{-i\alpha_n(\vec{\lambda})} \langle \psi_n(\vec{\lambda}) | \vec{\nabla}_{\lambda} \left\{ |\psi_n(\vec{\lambda})\rangle e^{i\alpha_n(\vec{\lambda})} \right\} \right]$$

$$= \mathrm{Im} \langle \psi_n(\vec{\lambda}) | \vec{\nabla}_{\lambda} \psi_n(\vec{\lambda}) \rangle + \vec{\nabla}_{\lambda} \alpha_n(\vec{\lambda})$$

$$\Rightarrow \quad \tilde{\vec{C}}_n(\vec{\lambda}) = \vec{C}_n(\vec{\lambda}) + \vec{\nabla}_{\lambda} \alpha_n(\vec{\lambda})$$

somit
$$\tilde{\gamma}_n(\mathcal{C}) = \oint_{\mathcal{C}} \tilde{\vec{C}}_n(\vec{\lambda}) \, d\vec{\lambda}$$

$$= \oint_{\mathcal{C}} \vec{C}_n(\vec{\lambda}) \, d\vec{\lambda} + \underbrace{\oint_{\mathcal{C}} \vec{\nabla}_{\lambda} \alpha_n(\vec{\lambda}) \, d\vec{\lambda}}_{= 0 \text{ wegen Eindeutigkeit der Wellenfkt}} = \gamma_n(\mathcal{C})$$

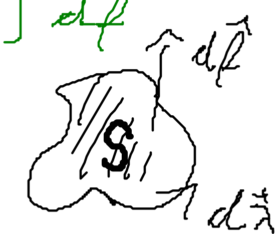
⇒ $\tilde{\gamma}_n(C) = \gamma_n(C)$ für eine geschlossene Kurve

$\boxed{\text{⇒ Berry-Phase über eine geschlossene Kurve ist eichinvariant}}$

Berry-Phase hängt nur von Kurvengeometrie ab, nicht aber von den Details, wie die Kurve durchlaufen wird. ⇒ "geom. Phase"

mit Stokes-Satz umformen:

$$\gamma_n(C) = \oint_C \vec{C}_n(\vec{\lambda})\, d\vec{\lambda} = \int_S \left[\nabla_\lambda \times \vec{C}_n(\vec{\lambda})\right] d\vec{f}$$



wobei $\nabla_\lambda \times \tilde{\vec{C}}_n = \nabla_\lambda \times \vec{C}_n$

wir definieren "Berry-Feld" (analog E-dynamik)

$$\vec{Q}_n(\vec{\lambda}) = \vec{\nabla}_\lambda \times \vec{C}_n(\vec{\lambda})$$

Was ist $\vec{Q}_n(\vec{\lambda})$? (⇝ Übung ⇝)

Kreuzprodukt

$$\Rightarrow \quad \vec{Q}_n(\vec{\lambda}) = \mathrm{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n | \vec{\nabla}_\lambda H | \psi_m \rangle \times \langle \psi_m | \vec{\nabla}_\lambda H | \psi_n \rangle}{(E_n - E_m)^2}$$

(alle E_n, ψ_n etc. $\vec{\lambda}$-abhängig)

Die Berry-Phase ist der Fluss von $\vec{Q}_n(\vec{\lambda})$ durch die Fläche S, die von der Kurve C eingeschlossen wird.

<u>Bem</u> Die Kurve kann einen Entartungspunkt umkreisen. Dann ist $\vec{Q}_n(\vec{\lambda})$ singulär in diesem Punkt.

Beispiel: (Spin im B-Feld)

$$H = -\vec{\sigma}\,\vec{B} \qquad \text{d.h. } \vec{\lambda} = \vec{B}$$

hier $\vec{B} = \vec{B}(t)$ <u>langsam</u> zeitabhängig

<u>hier:</u> $n = \pm$ entlang B

$$\vec{Q}_n(\vec{B}) = \Im m \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n(\vec{B}) | \vec{\sigma} | \psi_m(\vec{B}) \rangle \times \langle \psi_m(\vec{B}) | \vec{\sigma} | \psi_n(\vec{B}) \rangle}{(E_n(\vec{B}) - E_m(\vec{B}))^2}$$

$m, n = \pm$

$\Rightarrow$ Es ist $[E_n(\vec{B}) - E_m(\vec{B})] = (2B)^2$ für $m = +, n = -$

oder $m = -, n = +$