Berry - Phasen

1. Adiabatische Variablen

- Betrachte Quantensystem unter Einfluss einer langsam veränderlichen Größe $\vec{x}(t) = (x_1(t), x_2(t), \dots)$
- Betrachte zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t,\vec{x})\rangle + i\hbar\frac{\partial\vec{x}}{\partial t}\underbrace{\frac{\partial}{\partial\vec{x}}}_{\nabla_x}|\psi(t,\vec{x})\rangle = H(\vec{x})|\psi(t,\vec{x})\rangle$$

$\boxed{\frac{\partial\vec{x}}{\partial t} = \dot{\vec{x}}}$ soll hinreichend klein sein

- Fasse 2. Term als Störung auf, und löse $\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t,\vec{x})\rangle = H(\vec{x})|\psi(t,\vec{x})\rangle}$ (*)
- Fasse $\vec{x}$ als Parameter auf und löse $H(\vec{x})|\psi_n(\vec{x})\rangle = E_n|\psi_n(\vec{x})\rangle$ mit $\langle\psi_n(\vec{x})|\psi_m(\vec{x})\rangle = \delta_{nm}$

Adiabatisches Prinzip:

Falls das Quantensystem im Zustand $|\psi_n(\vec{x}_0)\rangle$, $\vec{x}_0 = \vec{x}(t_0)$ startet, dann verbleibt das System im Zustand $|\psi_n(\vec{x})\rangle$, $\vec{x}(t)$ solange zu keiner Zeit ein Entartungspunkt $(E_m(\vec{x}) = E_n(\vec{x}), n \neq m)$ auftaucht

Dynamische und adiabatische Phasen

Betrachte Beitendarstellung von $|\psi\rangle$: $|\psi(t)\rangle = c(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(\vec{x}(t'))}|\psi_n(\vec{x}(t))\rangle$

Einsetzen in (*)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = i\hbar\dot{c}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\int\dots}|\psi_n(\vec{x}(t))\rangle + c(t)E_n(\vec{x}(t))e^{-\frac{i}{\hbar}\int\dots}|\psi_n(\vec{x},t)\rangle$$
$$+ c(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\int\dots}\frac{\partial}{\partial t}|\psi_n(\vec{x}(t))\rangle$$
$$= H(\vec{x})\,c(t)\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\int\dots}|\psi_n(\vec{x}(t))\rangle$$

$\langle\psi_n(\vec{x}(t))|\cdot$ Gleichung:

$$i\hbar\dot{c}(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\int\dots} + \cancel{c(t)E_n(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}\int\dots}} + c(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\int\dots}\langle\psi_n(\vec{x}(t))|\frac{\partial}{\partial t}\psi_n(\vec{x}(t))\rangle$$
$$= \cancel{E_n(\vec{x})c(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\int\dots}}$$

$$\Rightarrow c(t) = c(0)\,e^{-\int_0^t \underbrace{\langle\psi_n(\vec{x}(t))|\frac{\partial}{\partial t}\psi_n(\vec{x}(t))\rangle}_{\langle\psi_n(\vec{x})|\nabla_x|\psi_n(\vec{x})\rangle\frac{d\vec{x}}{dt'}} dt'}$$

$$\boxed{c(t) = c(0)\,e^{-\int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}_t} d\vec{x}\langle\psi_n(\vec{x})|\nabla_x\psi_n(\vec{x})\rangle}}$$

$\langle \psi_n(\vec r)|\psi_n(\vec r)\rangle = 1$, $\vec\nabla_r \langle \psi_n(\vec r)|\psi_n(\vec r)\rangle = 0$

$\langle \vec\nabla_r \psi_n(\vec r)|\psi_n(\vec r)\rangle + \langle \psi_n(\vec r)|\vec\nabla_r \psi_n(\vec r)\rangle = 0$

$2\,\mathrm{Re}(\langle\psi_n(\vec r)|\vec\nabla_r\psi_n(\vec r)\rangle) = 0$

$\Rightarrow c(t) = c(0)\exp[-i\, i \int_{\vec r_0}^{\vec r_f} d\vec r \langle\psi_n(\vec r)|\vec\nabla_r\psi_n(\vec r)\rangle$

$$\boxed{c(t) = c(0)\exp[-i\gamma_n(C)]}$$

↳ Kurve die von $\vec r$ durchlaufen wird von $\vec r_0$ bis $\vec r_f$

- wähle $|\psi(t_0)\rangle = |\psi_n(\vec r(t_0))\rangle$ mit $t_0 = 0 \Rightarrow c(0) = 1$

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = e^{-i\gamma_n(C)}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} E_n(\vec r(t'))dt'}\, |\psi_n(\vec r(t))\rangle}$$

zusätzlicher Phasenfaktor

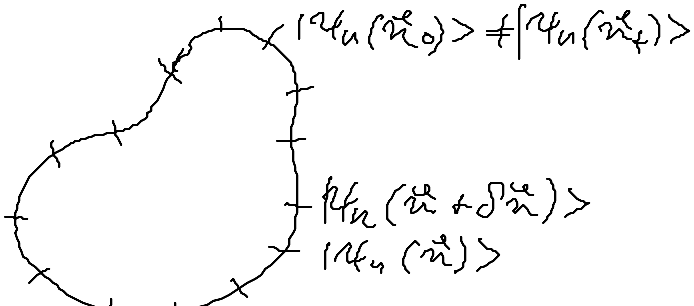
- Phase $\gamma_n(C)$ nennt man „**Berry Phase**"

Die Berry-Phase

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

Problem: $|\psi_n(\vec r)\rangle$ ist keine eindeutige Funktion von $\vec r$, da Eichfreiheit $|\tilde\psi_n(\vec r)\rangle = e^{i\alpha(\vec r)}|\psi_n(\vec r)\rangle$

Frage: Sind diese Phasen relevant? Betrachte geschlossene Kurve im "$\vec r$-Raum"



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

$d\varphi_n = \arg\langle\psi_n(\vec r)|\psi_n(\vec r+\delta\vec r)\rangle = \mathrm{Im}(\ln(\langle\psi_n(\vec r)|\psi_n(\vec r+\delta\vec r)\rangle))$

- eichabhängige Größe

entwickelt: $d\varphi_n = \underbrace{\arg}_{\mathrm{Im}(\ln(}\,(1 + \underbrace{\langle\psi_n(\vec r)|\vec\nabla_r\psi_n(\vec r)\rangle}_{\text{rein imaginär}}\, d\vec r\,)$

$$\boxed{d\varphi_n = \mathrm{Im}\,\langle\psi_n(\vec r)|\vec\nabla_r\psi_n(\vec r)\rangle\, d\vec r = -i\langle\psi_n(\vec r)|\vec\nabla_r\psi_n(\vec r)\rangle}$$

- Annahme: kein Entartungspunkt auf Kurve C

- Betrachte totale Phase über Kurve C:

$$\gamma_n(C) = \oint_C d\varphi_n = \mathrm{Im}\oint_C \langle\psi_n|\vec\nabla_R \psi_n\rangle\, d\vec R$$

- Man kann dies schreiben als $\boxed{\gamma_n(C) = \oint_C \vec C_n(\vec R)\, d\vec R}$ Berry-Phase

$\boxed{\vec C_n(\vec R) = \mathrm{Im}\,\langle\psi_n(\vec R)|\vec\nabla_R \psi_n(\vec R)\rangle}$ Berry-Vektor-Potential (Berry-connection)

Behauptung: $\gamma_n(C)$ ist eichinvariant

Beweis: $\tilde{\vec C}_n(\vec R) = \mathrm{Im}\,\langle\tilde\psi_n(\vec R)|\vec\nabla_R\tilde\psi_n(\vec R)\rangle$

$$= \mathrm{Im}\left(e^{-i\alpha(\vec R)}\langle\psi_n(\vec R)|\vec\nabla_R\left(|\psi_n(\vec R)\rangle e^{i\alpha(\vec R)}\right)\right)$$

$$= \mathrm{Im}\left(\langle\psi_n(\vec R)|\vec\nabla_R \psi_n(\vec R)\rangle + \vec\nabla_R\alpha_n(\vec R)\right)$$

$$\tilde{\vec C}_n(\vec R) = \vec C_n(\vec R) + \vec\nabla_R\alpha_n(\vec R)$$

Somit: $\tilde\gamma_n(C) = \oint \tilde{\vec C}_n(\vec R)\, d\vec R$

$$= \oint_C \vec C_n(\vec R)\, d\vec R + \underbrace{\oint_C \vec\nabla_R\alpha_n(\vec R)\, d\vec R}_{=0 \text{ wegen Eindeutigkeit der Wellenfkt}} = \gamma_n(C)$$

$\Rightarrow \tilde\gamma_n(C) = \gamma_n(C)$ für geschl. Kurve

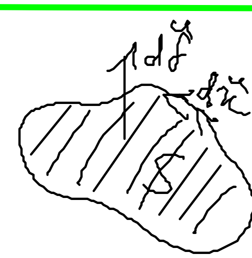
$\Rightarrow$ Berry-Phase ist über geschl. Kurve eichinvariant

Berry-Phase hängt nur von Kurvengeometrie ab, nicht von den Details, wie die Kurve durchlaufen wird $\Rightarrow$ „geometr. Phase"

Stokessches Theorem

$$\gamma_n(C) = \oint_C \vec C_n(\vec R)\, d\vec R = \int_S \left[\vec\nabla_R \times \vec C_n(\vec R)\right] d\vec f$$

wobei $\vec\nabla_R \times \tilde{\vec C}_n(\vec R) = \vec\nabla_R \times \vec C_n(\vec R)$



Def „Berry-Feld" $\vec Q_n(\vec R) = \vec\nabla_R \times \vec C_n(\vec R)$

$$\vec Q_n(\vec R) = \mathrm{Im}\sum_{m\neq n} \frac{\langle\psi_n|\vec\nabla_R H|\psi_m\rangle \times \langle\psi_m|\vec\nabla_R H|\psi_n\rangle}{(E_m - E_n)^2}$$

(alle E_n, ψ_n, $\vec R$-abhängig)

Die Berry-Phase ist der Fluss von $\vec Q_n(\vec R)$ durch die von der Kurve C eingeschlossenen Fläche S.

Bem Die Kurve C kann einen Entartungspunkt umkreisen, dann ist $\vec Q_n(\vec R)$ singulär an diesem Punkt.

Beispiel Spin im Magnetfeld

Betrachte $H = -\vec{\sigma}\vec{B}$ d.h. $\vec{R} = \vec{B}$

<u>hier</u>: $\vec{B} = \vec{B}(t)$ langsam zeitabhängig, $m,n = \pm$ entlang $\vec{B}$

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

Es ist $(E_n(\vec{B}) - E_m(\vec{B}))^2 = 2B^2$

für $m = \pm$, $n = \mp$