

Das Konzept der Berry-Phase in der Quantenmechanik

Johannes Michel

Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie
Gehalten am 11. Dezember 2013

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|------------------------------------------------------------------|-----------|
| 0 | Problemstellung | 3 |
| 1 | Das adiabatische Theorem | 3 |
| 1.1 | Parametrisierte Hamilton-Operatoren | 3 |
| 1.2 | Adiabatische Parameteränderungen | 3 |
| 2 | Die Berry-Phase | 4 |
| 2.1 | Zeitentwicklung von $ \psi\rangle$ | 4 |
| 2.2 | Darstellung als Wegintegral | 5 |
| 3 | Das Berry-Potential und die Eichinvarianz der Berry-Phase | 6 |
| 3.1 | Das Berry-Potential | 6 |
| 3.2 | Phasenfunktion und Eichung | 6 |
| 3.3 | Interpretation und Verwertbarkeit der Ergebnisse | 7 |
| 4 | Die Berry-Krümmung | 7 |
| 5 | Eine geometrische Analogie zur Berry-Phase | 9 |
| 5.1 | Lokale Tangentialbasis | 9 |
| 5.2 | Paralleltransport | 10 |
| 5.3 | Zeitentwicklung von ψ | 11 |
| 5.4 | „Potential“ und Krümmung | 11 |
| 6 | Zusammenfassung | 12 |

0 Problemstellung

Die ursprünglich von Berry [1] in den 1980er Jahren gestellte Frage lautet: Wenn ein gegebenes quantenmechanisches System von äußeren Parametern abhängt und die Parameter langsam variiert werden, ist der Endzustand dann vom Anfangszustand unterscheidbar, wenn die Parameter wieder in die ursprüngliche Konfiguration zurückgeführt werden? Und wenn ja, lässt sich dieser Unterschied quantifizieren? Beobachten? Die Antwort – wie sich herausstellen wird – ist ein dreifaches „Ja“.

1 Das adiabatische Theorem

1.1 Parametrisierte Hamilton-Operatoren

Sei \mathcal{H} ein Hilbert-Raum. Betrachte einen Hamilton-Operator $H(R_1, \dots, R_n)$ auf \mathcal{H} , der glatt von k Parametern $R_i \in \mathbb{R}$ abhängt; die Parameter werden im Folgenden zu $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^k$ zusammengefasst¹. Die Eigenwerte E_n zur Quantenzahl n sind dann offensichtlich auch von \mathbf{R} abhängig. Diese $E_n(\mathbf{R})$ seien auf dem gesamten zu betrachtenden Parameterraum diskret und nicht-entartet; mit $|n(\mathbf{R})\rangle \in \mathcal{H}$ wird im Folgenden der ebenfalls von \mathbf{R} abhängige, zu $E_n(\mathbf{R})$ gehörige normierte Eigenzustand bezeichnet,

$$H(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle . \quad (1)$$

Durch diese Definition ist $|n(\mathbf{R})\rangle$ allerdings nur bis auf einen eindimensionalen Vektorraum bestimmt: Die *Phasen* von $|n(\mathbf{R})\rangle$ für verschiedene \mathbf{R} sind auch durch die Normierung nicht festgelegt. Sie werden im Folgenden als eindeutig und stetig differenzierbar angenommen. Insbesondere kann dann auch $\mathbf{R} \mapsto |n(\mathbf{R})\rangle$ als glatte Abbildung $\mathbb{R}^k \rightarrow \mathcal{H}$ verstanden werden.

1.2 Adiabatische Parameteränderungen

Der Parametersatz $\mathbf{R}(t)$ sei nun derart zeitabhängig ($t \in [0, T]$), dass $H(\mathbf{R}(t))$ sich hinreichend langsam² ändert. Der Zustand $|\psi(t)\rangle$ werde nun zum Zeitpunkt $t = 0$ als Eigenzustand von $H(\mathbf{R}(0))$ zu einer festen Quantenzahl n

¹ Diese und viele folgende Wahlen in der Notation folgen [1], ebenso wie der Gedankengang selbst. Die Herleitung der Berry-Phase ist allerdings in [2], [3] und [4] äußerst ähnlich durchgeführt worden.

² [2, S. 8] gibt als hinreichendes Kriterium für „Langsamkeit“ die Abschätzung $\langle m|\dot{H}|n\rangle \ll |E_m - E_n|^2$ (für alle m) an.

präpariert:

$$|\psi(0)\rangle = |n(\mathbf{R}(0))\rangle . \quad (2)$$

Das (hier axiomatisch eingeführte) adiabatische Theorem sagt dann aus, dass für alle Zeiten $t \in [0, T]$ gilt

$$|\psi(t)\rangle = \lambda(t) |n(\mathbf{R}(t))\rangle . \quad (3)$$

Der physikalische Zustand $|\psi(t)\rangle$ bleibt also für alle Zeiten Eigenzustand des Hamilton-Operators zur Quantenzahl n , auch wenn sich die zugehörige Energie ändert. Anschaulich wird das System durch langsame Parameteränderungen nicht „aus der Ruhe gebracht“.

An das adiabatische Theorem schließen sich zwei Beobachtungen an:

1. Aus Normiertheit von $|\psi\rangle$ folgt $|\lambda(t)| = 1$, λ ist *Phasenfaktor*.
2. Zu beachten sind an dieser Stelle die verschiedenen Formen der Zeitabhängigkeit: Während $|\psi(t)\rangle$ über $\lambda(t)$ explizit von der Zeit abhängt, ist $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$ nur *implizit* über die Parameter $\mathbf{R}(t)$ zeitabhängig. Es gilt also

$$\frac{\partial}{\partial t} |n(\mathbf{R}(t))\rangle = 0 , \quad (4)$$

nach Kettenregel aber

$$\frac{d}{dt} |n(\mathbf{R}(t))\rangle = \nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R})\rangle \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt} . \quad (5)$$

2 Die Berry-Phase

2.1 Zeitentwicklung von $|\psi\rangle$

Der Phasenfaktor λ hat keinen Einfluss auf die Erwartungswerte von Observablen und wird entsprechend häufig außer Acht gelassen. Nach dem adiabatischen Theorem unterscheiden sich aber der Ursprungszustand $|\psi(0)\rangle$ und der Zustand nach einer zyklischen Parameteränderung $|\psi(T)\rangle$ nur gerade um den Faktor $\lambda(T)$. Im Sinne der ursprünglichen Fragestellung rückt also λ ins Zentrum des Interesses. Wir wählen folgenden Ansatz³ für $\lambda(t)$:

$$\lambda(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}S(t)\right) \exp(i\gamma_n(t)) , \quad (6)$$

$$S(t) := \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt' . \quad (7)$$

³[Nach 1, S. 46].

Die so genannte dynamische Phase $S(t)$ ist hier die Verallgemeinerung der Zeitentwicklung reiner Zustände $\exp(-\frac{i}{\hbar}E_n \cdot t)$ für infinitesimale Zeitintervalle dt' . Das Produkt aller infinitesimalen Phasenfaktoren geht dann über in einen Phasenfaktor mit dem Integral über alle Phasen im Exponenten. Die Phase $\gamma(t)$ ist die noch näher zu bestimmende *Berry-Phase*.

Da $|\psi(t)\rangle$ als physikalischer Zustand von der zeitabhängigen Schrödingergleichung⁴ regiert wird und nach adiabatischem Theorem (3) ein Eigenzustand von $H(\mathbf{R}(t))$ zum Eigenwert $E_n(\mathbf{R}(t))$ ist, gilt

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = E_n(\mathbf{R}(t)) |\psi(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt} S(t) \right) |\psi(t)\rangle . \quad (8)$$

Explizites Ableiten von $|\psi(t)\rangle = \lambda(t) |n(\mathbf{R}(t))\rangle$ nach t liefert aber nach Leibnizregel weitere Terme:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt} S(t) \right) |\psi(t)\rangle - \hbar \left(\frac{d}{dt} \gamma_n(t) \right) |\psi(t)\rangle + i\hbar \lambda(t) \frac{d}{dt} |n(\mathbf{R}(t))\rangle . \quad (9)$$

Die Berry-Phase kann also offensichtlich keine triviale Konstante sein; vielmehr liefert Vergleich von (8) und (9) eine im Allgemeinen nicht verschwindende Zeitableitung von γ_n

$$\frac{d}{dt} \gamma_n(t) = i \langle n(\mathbf{R}(t)) | \frac{d}{dt} |n(\mathbf{R}(t))\rangle = i \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R})\rangle \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt} \quad (10)$$

nach Multiplikation mit $\langle \psi(t) | = \lambda^*(t) \langle n(\mathbf{R}(t)) |$ und Einsetzen von (5).

Zur Vereinfachung der Notation⁵ wird der Differentialoperator $\nabla_{\mathbf{R}}$ im Folgenden als ∇ abgekürzt. Das Objekt $\nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R})\rangle \in \mathcal{H}^k$ wird kurz $|\nabla n\rangle$ geschrieben⁶ und kann sowohl komponentenweise in Bracket-Notation $\langle m | \nabla n \rangle$ als auch „skalar“ als k -stelliger Vektor $\mathbf{v} \cdot |\nabla n\rangle$ in Produkte eingehen.

2.2 Darstellung als Wegintegral

Integration von (10) über die Zeit führt auf ein *Wegintegral* entlang $\mathcal{C} : t \mapsto \mathbf{R}(t), t \in [0, T]$ und liefert als ersten Ausdruck für die Berry-Phase

$$\gamma_n(T) = i \int_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \langle n | \nabla n \rangle = - \text{Im} \int_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \langle n | \nabla n \rangle . \quad (11)$$

⁴Für die Hilberträume der Spinoren oder Spinorwellenfunktionen ist hier völlig analog die Pauli-Gleichung einzusetzen.

⁵Auch diese „Entrümpelung“ der Notation entspricht [1, S. 47].

⁶Ebenso werden die lokalen Eigenvektoren $|n\rangle$ „entschlackt“ ohne Argumente geschrieben.

Die Auswertung des Imaginärteils genügt⁷, weil gilt

$$0 = \nabla 1 = \nabla \langle n|n \rangle = \langle \nabla n|n \rangle + \langle n|\nabla n \rangle = \langle n|\nabla n \rangle + (\langle n|\nabla n \rangle)^* . \quad (12)$$

Insbesondere ist also $\gamma_n(T) \in \mathbb{R}$. Die Normierung von $|\psi\rangle$ bleibt damit gewahrt, die Bezeichnung „Phase“ ist gerechtfertigt.

3 Das Berry-Potential und die Eichinvarianz der Berry-Phase

3.1 Das Berry-Potential

Mit der Bezeichnung

$$\mathbf{A}_n := -\text{Im} \langle n|\nabla n \rangle \quad (13)$$

gilt insbesondere auf geschlossenen Pfaden $\mathcal{C}(0) = \mathcal{C}(T)$ der Ausdruck

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_n \quad (14)$$

für die Berry-Phase γ_n , die so manifest eine Eigenschaft der Geometrie des Parameterraums ist. In Anlehnung an das Vektorpotential aus der Elektrodynamik heißt \mathbf{A}_n *Berry-Potential*.

3.2 Phasenfunktion und Eichung

Die Phasen der lokalen Eigenzustände wurden eingangs nur als stetig differenzierbar angenommen, ansonsten blieben sie arbiträr. Von Interesse ist also das Verhalten der Berry-Phase bei einer abweichenden Wahl der lokalen Phasen. Betrachte⁸ hierzu eine glatte Phasenfunktion $\mu : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$,

$$|n'(\mathbf{R})\rangle = e^{i\mu(\mathbf{R})} |n(\mathbf{R})\rangle . \quad (15)$$

Einsetzen in (13) liefert für das Berry-Potential

$$\mathbf{A}'_n = -\text{Im} \langle n'|\nabla (e^{i\mu} |n\rangle) = \mathbf{A}_n - \nabla\mu . \quad (16)$$

Die Wahl der Phasen der lokalen Eigenzustände entspricht also einer *Eichung* des Berry-Potentials. Die Auswertung des Wegintegrals in (14) liefert nun

$$\gamma'_n(\mathcal{C}) = \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_n - \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \cdot \nabla\mu = \gamma_n(\mathcal{C}) , \quad (17)$$

⁷Das Argument findet sich in dieser expliziten Form bei [3, S. 8].

⁸Das Verhalten von γ_n unter Umeichungen findet sich schon bei [1, S. 48], ebenso bei [3, S. 8].

weil das geschlossene Wegintegral über den Gradienten von μ offensichtlich verschwindet. Die Berry-Phase selbst ist *eichinvariant*, die freie Wahl der lokalen Phasen schränkt die Gültigkeit des bisherigen Ergebnisses (14) – wie zu erwarten war – nicht ein. Andersherum kann die Berry-Phase auf geschlossenen Pfaden nicht durch eine geschickte Wahl der Eichung eliminiert werden.

3.3 Interpretation und Verwertbarkeit der Ergebnisse

Vor dem Hintergrund der Eichinvarianz, die die Berry-Phase als *intrinsische* Eigenschaft von parametrisierten Systemen ausweist, hat eine erste Diskussion der Ergebnisse eine solide Grundlage.

- Die Parametrisierung reduziert die Abhängigkeit eines quantenmechanischen System von seiner Umwelt auf wenige „Stellschrauben“, das System kann dann als annähernd isoliert betrachtet werden.
- Die Berry-Phase ist prinzipiell mithilfe geeigneter Interferenzexperimente⁹ beobachtbar.
- Beim Versuch der „Abkapselung“ eines quantenmechanischen Systems von der Umwelt treten also beobachtbare Größen auf, die *nicht* als Erwartungswerte selbstadjungierter Operatoren betrachtet werden können.
- Nimmt man die auftretenden Phasen in Kauf, lässt sich durch die Parametrisierung ein Problem auf den Fall des isolierten Systems zurückführen.
- Im vollständig quantenmechanisch beschriebenen (d.h. isolierten) System tritt keine Berry-Phase auf.

4 Die Berry-Krümmung

Im Folgenden wird der Spezialfall $k = 3$, $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^3$ eines dreidimensionalen Parameterraumes betrachtet¹⁰. Mit der *Berry-Krümmung* $\mathbf{V}_n := \nabla \times \mathbf{A}_n$

⁹ S. dazu die Ausarbeitung von Herrn Olschewski; aus dem Originalartikel [1] selbst stammt der Vorschlag, einen von zwei kohärenten Neutronenstrahlen einem entlang der Bahn variierenden Magnetfeld auszusetzen.

¹⁰ Für viele Anwendungen genügt dieser Sonderfall; die natürliche Verallgemeinerung in allen anderen Fällen ist die der Berry-Krümmung als 2-Form.

gilt unter Ausnutzung des Satzes von Stokes

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_n = \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{V}_n \quad (18)$$

für jede einfach zusammenhängende Fläche S im Parameterraum, die $\partial S = \mathcal{C}$ erfüllt. Die Berry-Krümmung ist (in völliger Analogie zum Magnetfeld in der Elektrodynamik) ebenso eichinvariant wie die Berry-Phase, bei Wahl einer Phasenfunktion μ verschwindet der Term $\nabla \times \nabla \mu$. Für die Berry-Krümmung gilt nun weiter¹¹

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_n &= -\text{Im} \nabla \times \langle n | \nabla n \rangle \\ &= -\text{Im} \langle \nabla n | \times | \nabla n \rangle - \text{Im} \langle n | \nabla \times \nabla | n \rangle \\ &= -\text{Im} \langle \nabla n | \times | \nabla n \rangle , \end{aligned} \quad (19)$$

weil die Rotation des Gradienten verschwindet. Einführen einer Identität $\mathbb{1} = \sum_m |m\rangle \langle m|$, die von allen Vektoroperationen im Parameterraum unabhängig ist, führt auf

$$\mathbf{V}_n = -\text{Im} \sum_{m \neq n} \langle \nabla n | m \rangle \times \langle m | \nabla n \rangle . \quad (20)$$

Der Summand $m = n$ kann hier vernachlässigt werden, da in (12) gezeigt wurde, dass $\langle n | \nabla n \rangle$ rein imaginärwertig ist, Produkte dieses Terms mit sich selbst also keinen Beitrag zum Imaginärteil leisten. Für beliebige Quantenzahlen n, m gilt nun nach Leibnizregel (Differential einer Multilinearform)

$$\nabla \langle m | H | n \rangle = \langle \nabla m | H | n \rangle + \langle m | (\nabla H) | n \rangle + \langle m | H | \nabla n \rangle , \quad (21)$$

nach Einsetzen der Eigenwertgleichung (1) und unter Ausnutzung der Hermitizität von H also

$$\nabla \langle m | H | n \rangle = E_n \langle \nabla m | n \rangle + \langle m | (\nabla H) | n \rangle + E_m \langle m | \nabla n \rangle . \quad (22)$$

Für $n \neq m$ gilt aber auch

$$\nabla \langle m | H | n \rangle = \nabla \langle m | E_n | n \rangle = E_n \langle \nabla m | n \rangle + E_n \langle m | \nabla n \rangle , \quad (23)$$

weil der dritte Summand $(\nabla E_n) \langle m | n \rangle = 0$ ausfällt. Ein Vergleich der beiden Ausdrücke liefert schließlich

$$\langle m | \nabla n \rangle = \frac{\langle m | (\nabla H) | n \rangle}{E_n - E_m} . \quad (24)$$

Einsetzen in (20) liefert für die Berry-Krümmung

$$\mathbf{V}_n = -\text{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n | (\nabla H) | m \rangle \times \langle m | (\nabla H) | n \rangle}{(E_n - E_m)^2} . \quad (25)$$

¹¹ Die folgenden Herleitungsschritte entsprechen [4, S. 466,467] und [3, S. 9]

Dieser Ausdruck ist nun offensichtlich von der Wahl der lokalen Phasen unabhängig: Jeder lokale Eigenvektor $|n\rangle, |m\rangle$ tritt auch komplex konjugiert auf. Da bei Summation von (25) über alle Quantenzahlen n im (antisymmetrischen) Kreuzprodukt jeder Summand auch je einmal mit permutierten n, m auftritt, folgt als Korollar

$$\sum_n \mathbf{V}_n = 0, \text{ also } \sum_n \gamma_n(\mathcal{C}) = 0. \quad (26)$$

Augenfällig ist auch der enge Zusammenhang der Berry-Krümmung mit Entartungspunkten der Energieeigenwerte im Parameterraum: Umgebungen eines solchen Entartungspunktes \mathbf{R}^* mit $E_n(\mathbf{R}^*) = E_m(\mathbf{R}^*)$ liefern im Flächenintegral (18) einen starken Beitrag zur Berry-Phase, weil der Nenner in (25) singulär wird.

Zur Auswertung der Berry-Phase kann nun von Fall zu Fall zwischen den Ausdrücken (14) und (18) frei gewählt werden. Der Weg über das Berry-Potential enthält den nichttrivialen Gradienten $|\nabla n\rangle$ der Eigenzustände, beinhaltet also einen mindestens dreistufigen Prozess: Der Hamilton-Operator muss für jeden Parameter einzeln diagonalisiert, die Phasen der Eigenzustände „geglättet“ und zuletzt der Gradient ermittelt werden. Diese Probleme¹² umgeht Ausdruck (25), da nur noch Gradienten des Hamilton-Operators selbst auftreten. Nachteilig ist hier die nötige Summation über alle Quantenzahlen.

5 Eine geometrische Analogie zur Berry-Phase

Das Problem der Berry-Phase hat eine ansprechende Analogie im Paralleltransport von Vektoren auf Flächen und der dabei auftretenden *geometrischen Phase*, für die im Folgenden¹³ in hoher formaler Übereinstimmung mit dem Vorgehen Berrys ein Ausdruck gefunden werden soll.

5.1 Lokale Tangentialbasis

Sei $M \subset \mathbb{R}^3$ eine Untermannigfaltigkeit¹⁴, die global durch eine Karte $\phi : \mathbf{R} \mapsto \phi(\mathbf{R})$ parametrisiert wird. Für ein gewisses $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^2$ seien $\mathbf{e}_1(\mathbf{R})$ und

¹²Zu den Vorteilen der Darstellung über die Berry-Krümmung s. auch [3, S. 9].

¹³Die Herleitung der geometrischen Phase entspricht – abgesehen von wenigen Abänderungen der Notation – in Gänze [2, S. 3–6].

¹⁴Der einbettende Raum kann allgemeiner ein beliebiger endlichdimensionaler euklidischer Vektorraum sein.

$\mathbf{e}_2(\mathbf{R})$ eine lokale Orthonormalbasis des Tangentialraums $T_{\phi(\mathbf{R})}M$. Fasse beide Vektoren zusammen zu

$$\mathbf{u}(\mathbf{R}) := \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_1(\mathbf{R}) + i\mathbf{e}_2(\mathbf{R})) \in \mathbb{C}^3 . \quad (27)$$

Die Phasen der lokalen Basisvektoren $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ sind hierdurch nicht festgelegt. Wir nehmen erneut an, dass sie stetig differenzierbar von \mathbf{R} abhängen. Das Analogon des Tangentialraums ist im Falle der Berry-Phase der jeweilige Eigenraum zur Quantenzahl n , der lokale Basisvektor $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ entspricht dem lokalen Eigenzustand $|n\rangle$.

5.2 Paralleltransport

Betrachte nun einen Pfad $\mathcal{C} : [0, T] \rightarrow U, t \mapsto \mathbf{R}(t)$ im Parameterraum. Die Vektoren $\mathbf{v}_1(0) = \mathbf{e}_1(\mathbf{R}(0))$, $\mathbf{v}_2(0) = \mathbf{e}_2(\mathbf{R}(0))$ sollen entlang $\phi \circ \mathcal{C}$ transportiert werden unter Beachtung der folgenden zwei *Bedingungen für Paralleltransport*:

1. $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ sollen orthonormale Tangentialvektoren bleiben,

$$\mathbf{v}_i(t) \in T_{\phi(\mathbf{R}(t))}M , \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_j = \delta_{ij} . \quad (28)$$

2. $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ sollen keine Drehungen in der Tangentialebene erfahren, ihre zeitliche Änderung ist rein normal:

$$\dot{\mathbf{v}}_i(t) \in N_{\phi(\mathbf{R}(t))}M \Rightarrow \mathbf{v}_i \cdot \dot{\mathbf{v}}_j = 0 . \quad (29)$$

Schreibe kurz

$$\psi(t) := \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{v}_1(t) + i\mathbf{v}_2(t)) \in \mathbb{C}^3 \quad (30)$$

mit $\psi(0) = \mathbf{u}(\mathbf{R}(0))$. Damit zusammengefasst lauten die Bedingungen für Paralleltransport in \mathbb{C}^3 folgendermaßen:

Tangentialbedingung:

$$\psi(t) = \lambda(t) \mathbf{u}(\mathbf{R}(t)) \text{ mit } |\lambda| = 1 = \psi^* \cdot \psi . \quad (31)$$

Drehbedingung:

$$\psi^* \cdot \dot{\psi} = 0 . \quad (32)$$

Die Tangentialbedingung ist hierbei das Analogon zum adiabatischen Theorem (3). Auch dort ist gefordert, dass der physikalische Zustand $|\psi\rangle$ für alle Zeiten bis auf den Eigenraum zum Eigenwert n festgelegt ist. Die Drehbedingung hat als Differentialgleichung ersten Grades in der Zeit ihre Analogie in der zeitabhängigen Schrödingergleichung (8).

5.3 Zeitentwicklung von ψ

Einsetzen des Ansatzes $\lambda(t) = \exp(i\gamma(t))$ in die Drehbedingung (32) liefert

$$i\dot{\gamma} \mathbf{u}^* \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u}^* \cdot \frac{d}{dt} \mathbf{u} = 0 . \quad (33)$$

Wegen Normiertheit von \mathbf{u} und nach Kettenregel¹⁵ gilt daher

$$\dot{\gamma} = i \mathbf{u}^* \cdot \nabla \mathbf{u} \frac{d\mathbf{R}}{dt} . \quad (34)$$

Wegintegration entlang \mathcal{C} führt auf

$$\gamma(T) = i \int_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \mathbf{u}^* \cdot \nabla \mathbf{u} = -\text{Im} \int_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \mathbf{u}^* \cdot \nabla \mathbf{u} . \quad (35)$$

Der gewählte Ansatz ist offensichtlich analog zum Ansatz für $|\psi(t)\rangle$ in der Herleitung der Berry-Phase (abzüglich des Umwegs über die – physikalisch begründete – dynamische Phase). Die Interpretation von γ liegt hier auf der Hand: γ beschreibt den Phasenfaktor zwischen \mathbf{u} und ψ , die beide über reelle Vektoren jeweils als Real- und Imaginärteil definiert sind. γ ist also nichts anderes als der Winkel, um den \mathbf{e}_1 und \mathbf{e}_2 in der durch sie aufgespannten (nämlich tangentialen) Ebene rotiert werden müssten, um wieder mit \mathbf{v}_1 und \mathbf{v}_2 übereinzustimmen.

5.4 „Potential“ und Krümmung

In völliger Analogie zu Berry-Potential und -Krümmung gilt nun mit $\mathbf{A} := \mathbf{u}^* \cdot \nabla \mathbf{u}$ und dem Satz von Stokes in zwei Dimensionen für geschlossene¹⁶ Pfade $\mathcal{C} = \partial S$ wieder

$$\gamma(\mathcal{C}) = \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A} = \int_S V dS \text{ mit } V = \partial_1 A_2 - \partial_2 A_1 . \quad (36)$$

Für V gilt dann

$$V = -\text{Im}(\partial_1 \mathbf{u}^* \partial_2 \mathbf{u} - \partial_2 \mathbf{u}^* \partial_1 \mathbf{u}) = -(\partial_1 \mathbf{e}_1 \partial_2 \mathbf{e}_2 - \partial_2 \mathbf{e}_1 \partial_1 \mathbf{e}_2) . \quad (37)$$

Im Spezialfall der *Einheitssphäre* errechnet man mit den üblichen Parametern φ, θ und den bekannten Tangentialvektoren $\mathbf{e}_\varphi, \mathbf{e}_\theta$ den Ausdruck $V = \sin \theta$ und damit

$$\gamma(\mathcal{C}) = \int_S d\varphi d\theta \sin \theta = \int_S d\Omega = \Omega_S . \quad (38)$$

¹⁵ Der Operator ∇ bezeichnet hier erneut Differentiation im Parameteraum.

¹⁶ Die berandete Fläche S wird hier zusätzlich als einfach zusammenhängend angenommen.

Auf Teilmengen der Einheitskugel ist die Drehung, die ein parallel transportierter Vektor auf geschlossenen Pfaden erfährt, also gerade gleich dem Raumwinkel, unter dem der Ursprung die vom Pfad berandete Fläche sieht. Ein strenger Beweis ist mit Kreide und Basketball leicht zu führen.

6 Zusammenfassung

- Bei adiabatischen, zyklischen Änderungen der äußeren Parameter eines quantenmechanischen Systems tritt ein Phasenterm auf, die Berry-Phase.
- Die Berry-Phase lässt sich als Wegintegral über ein Vektorpotential schreiben. Die Wahl der Phasen der parameterabhängigen Eigenzustände des Systems entspricht einer Eichung des Potentials, die Berry-Phase selbst ist eichinvariant.
- Die Berry-Krümmung liefert einen alternativen Ausdruck für die Berry-Phase, in dem die Phasen der Eigenzustände direkt eliminiert werden können.
- Das Problem adiabatischer Prozesse in der Quantenmechanik hat eine enge Analogie im zyklischen Paralleltransport auf Flächen. Auch dort treten Rotationen der transportierten Vektoren auf.

Literatur

- [1] M. V. Berry. „Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes“. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* 392.1802 (März 1984), S. 45–57.
- [2] P. Bruno. „Berry phase effects in magnetism“. *Magnetism goes nano – Lecture Manuscripts of the 36th Spring School of the Institute of Solid State Research*. Hrsg. von S. Blügel, T. Brückel und C. M. Schneider. Forschungszentrum Jülich, 2005.
- [3] B. A. Bernevig und T. L. Hughes. „Topological Insulators and Topological Superconductors“. Princeton University Press, Princeton und Oxford, 2013. Kap. 2, S. 6–14.
- [4] J. J. Sakurai. „Modern Quantum Mechanics“. Addison-Wesley, New York, 1994. Kap. Supplement I, S. 464–473.