Berry-Phase

Anwendung und Beispiele

Helena Osthues

Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie

21. Januar 2015

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **3**

2 Spin im Magnetfeld **3**

2.1 Theoretische Betrachtung 3

2.2 Experimenteller Nachweis 5

3 Aharonov-Bohm Effekt **6**

1 Einleitung

Die Berry-Phase oder geometrische Phase tritt für nichtholonome Systeme auf. Diese Systeme kehren nicht wieder in ihren Ausgangszustand zurück, wenn ihre Parameter nach beliebigen Änderungen wieder ihre Anfangswerte einnehmen.
Ein klassisches Beispiel ist das Foucault'sche Pendel. Auch in der Quantenmechanik können wir Beispiele finden, für die wir die bei adiabatischen Änderungen auftretende geometrische Phase für einen geschlossenen Weg im Parameterraum berechnen können. Im Folgenden sollen der Spin im Magnetfeld und der Aharonov-Bohm Effekt als solche erläutert werden.

2 Spin im Magnetfeld

2.1 Theoretische Betrachtung

Ein Teilchen mit Spin s befinde sich in einem Magnetfeld $\vec{B}$. Die Spinquantenzahl n kann $2s+1$ Werte zwischen $-s$ und s annehmen. Der Hamiltonoperator hat folgende Form:

$$H(\vec{B}) = \kappa \vec{B}\vec{S}. \tag{1}$$

Hier ist $\vec{S}$ der Spinoperator mit den Eigenzuständen $|s\,n\rangle$ und $\kappa = -\frac{\gamma}{\hbar}$ ein konstanter Faktor mit dem gyromagnetischen Verhältnis γ. Die Energieeigenwerte sind dann

$$E_n(\vec{B}) = \kappa \hbar B n. \tag{2}$$

Erfolgt die Änderung eines Parameters $\vec{R}$ im Parameterraum entlang eines geschlossenen Weges C, der eine Fläche F einschließt, kann die geometrische Phase γ_n mit Hilfe der Berrykrümmung

$$\vec{V_n}(\vec{R}) = \mathrm{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n(\vec{R})|\nabla_{\vec{R}} H(\vec{R})|m(\vec{R})\rangle \times \langle m(\vec{R})|\nabla_{\vec{R}} H(\vec{R})|n(\vec{R})\rangle}{(E_m(\vec{R}) - E_n(\vec{R}))^2} \tag{3}$$

berechnet werden:

$$\gamma_n(C) = -\int\int \vec{V_n}(\vec{R}) \cdot \mathrm{d}\vec{F}. \tag{4}$$

In diesem Beispiel soll nun das Magnetfeld ausreichend langsam geändert werden, sodass der Adiabatensatz gilt. Die Parameter $\vec{R}$, von denen der Hamiltonoperator abhängt, sind nun also die Komponenten von $\vec{B}$. Mit (1) und (2) ist

$$\vec{V_n}(\vec{B}) = \mathrm{Im} \frac{1}{\hbar^2 B^2} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n|\vec{S}|m\rangle \times \langle m|\vec{S}|n\rangle}{(m-n)^2}. \tag{5}$$

Um die Wirkung des Spinoperators auf die Eigenzustände einfacher berechnen zu können wird nun die z-Achse in Richtung des Magnetfeldes gelegt, so dass $\vec{B} = B\vec{e_z}$. Mit Hilfe von

$$\begin{aligned} S_z\,|s\,n\rangle &= \hbar n\,|s\,n\rangle \\ S_\pm\,|s\,n\rangle = (S_x \pm iS_y)\,|s\,n\rangle &= \hbar\sqrt{s(s+1) - n(n+1)}\,|s\,n \pm 1\rangle \end{aligned} \tag{6}$$

und

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{1}{2}(S_+ + S_-) \\ S_y &= i\frac{1}{2}(S_+ - S_-) \end{aligned} \tag{7}$$

lassen sich die in der Summe (5) auftretenden Matrixelemente berechnen.

$$\langle s\, n \pm 1|S_x|s\, n\rangle = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{s(s+1) - n(n \pm 1)} \tag{8}$$

$$\langle s\, n \pm 1|S_y|s\, n\rangle = \mp\frac{1}{2}\hbar i\sqrt{s(s+1) - n(n \pm 1)} \tag{9}$$

Alle Summanden in denen $\langle m|S_{x,y}|n\rangle$ mit $m \neq n \pm 1$ oder $\langle m|S_z|n\rangle$ $(m \neq n)$ auftreten, sind auf Grund der Orthonormiertheit der Eigenzustände null. Da letztere in den Komponenten V_x und V_y enthalten sind, ist $V_x = V_y = 0$. Die z-Komponente errechnet sich mit (8) und (9) zu

$$\begin{aligned} (\vec{V_n})_z &= \mathrm{Im}\frac{1}{B^2}\Big(\langle n|S_x|n+1\rangle \langle n+1|S_y|n\rangle - \langle n|S_y|n+1\rangle \langle n+1|S_x|n\rangle \\ &\quad + \langle n|S_x|n-1\rangle \langle n-1|S_y|n\rangle - \langle n|S_y|n-1\rangle \langle n-1|S_x|n\rangle \Big) \\ &= \mathrm{Im}\frac{1}{B^2}(-in) \\ &= \frac{n}{B^2}. \end{aligned} \tag{10}$$

Also ist in einem festen Koordinatensystem die Berry-Krümmung

$$\vec{V_n}(\vec{B}) = n\frac{\vec{B}}{B^3} \tag{11}$$

und damit die Berry-Phase

$$\gamma_n(C) = -\int\int \vec{V_n}(\vec{R}) \cdot \mathrm{d}\vec{S} = -n\,\Omega. \tag{12}$$

Hier bezeichnet Ω den Raumwinkel, der wie folgt definiert ist:

$$\Omega = \int\int_F sin\vartheta\, \mathrm{d}\vartheta \mathrm{d}\varphi \tag{13}$$

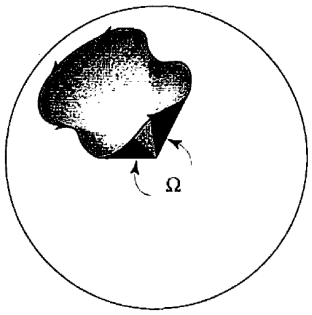


Abbildung 1: Beliebiger geschlossener Weg auf der Oberfläche einer Kugel, durch den ein Raumwinkel Ω definiert ist [2] .

Die resultierende geometrische Phasen ist damit abhängig von der Größe des Raumwinkels Ω, der vom Vektor des Magnetfeldes beschrieben wird. Insbesondere hat die Form des Weges C keinen Einfluss

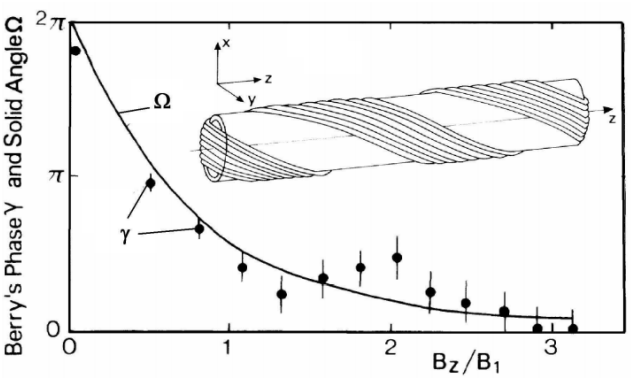
auf die Phasenverschiebung, solange der Winkel Ω eingeschlossen wird. Außerdem existiert eine Abhängigkeit von der Spinquantenzahl n, nicht jedoch direkt vom Spin s.
Mit (12) ist es möglich die Phase eines Teilchens beliebig zu ändern. Wird zum Beispiel ein Fermion ($s = \frac{1}{2}$) einem Magnetfeld ausgesetzt, welches eine Kreisbewegung in der Ebene beschreibt ($\Omega = 2\pi$), so ist der resultierende Phasenfaktor für $n = \frac{1}{2}$

$$e^{i\gamma} = e^{-i\cdot\frac{1}{2}\cdot 2\pi} = -1.$$

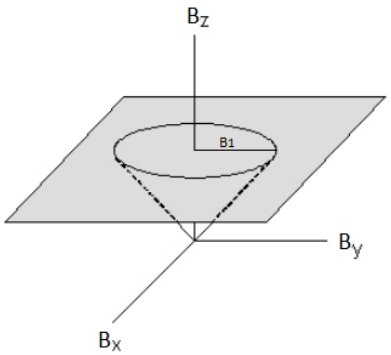
Für Bosonen($s = 1$, $n = 1$) kann ein solcher Phasenwechsel durch ein Magnetfeld erreicht werden, dessen Vektor einen Kegel mit halbem Öffnungswinkel 60° ($\Omega = \pi$) beschreibt.

2.2 Experimenteller Nachweis

In seinem 1984 veröffentlichtem Paper [4] schlägt Berry vor, einen polarisierten, monoenergetischen Teilchenstrahl der Spinquantenzahl n aufzuspalten und den einen Teilstrahl durch ein Magnetfeld zu leiten. Dieses soll sich langsam entlang eines Weges C, der den Raumwinkel Ω einschließt, ändern. Nun werden die Strahlen wieder vereint und die Intensität des Ausgangsstrahls für verschiedene Werte Ω aufgenommen.
Für die praktische Durchführung stellte sich heraus, dass es sinnvoller ist, den Strahl nicht aufzuspalten, sondern die Differenz der geometrischen Phasen zweier Zustände $n = \frac{1}{2}$ und $n = -\frac{1}{2}$ zu untersuchen. Bitter und Dubbers gelang der Beweis mit Hilfe eines spiralförmigen Magentfeldes (vgl. Abbildung 2). In dieses wird in z-Richtung ein langsamer ($v \approx 500\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}$), monochromatischer Strahl transversal polarisierter Neutronen geleitet. Diese sehen während des Durchlaufens der Spule in longitudinaler Richtung eine konstante Magnetfeldkomponente B_z und in transversaler Richtung eine Komponente B_1, die eine ganze Drehung in der xy-Ebene beschreibt (vgl. Abbildung 2, rechts). Nach Austritt der Neutronen aus der Spule wird die Polarisation gemessen und daraus die relative Phase $\gamma_{1/2} - \gamma{-}1/2$ bestimmt. Die Größe des eingeschlossenen Raumwinkels Ω lässt sich durch die Variation des Betrages B_z ändern. In Abbildung 2 (a) ist Ω in Abhängigkeit von B_z/B_1 aufgetragen. Die Messergebnisse der Differenzen der Berry-Phasen $\gamma_{-\frac{1}{2}} - \gamma_{\frac{1}{2}}$ sind ebenfalls eingetragen. Sie weichen, wie nach (12) erwartet, kaum von den theoretischen Werten für Ω ab.



(a) Versuchsergebnis und -aufbau. Bestimmung der Berryphase von Neutronen im Magnetfeld.[3]



(b) Änderung des Magnetfeldes im Parameterraum.

Abbildung 2: Experiment von Bitter und Dubbers zum Nachweis der Berry-Phase

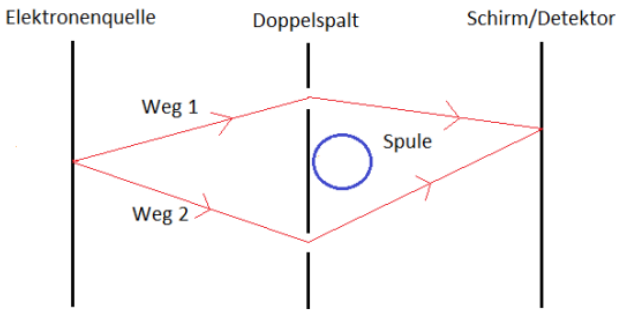
3 Aharonov-Bohm Effekt

Klassisch sind die Felder

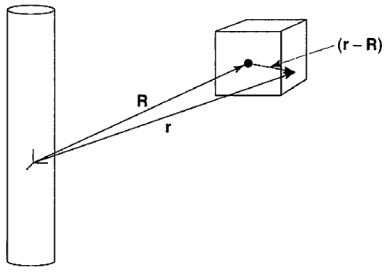
$$\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \tag{14}$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \tag{15}$$

die physikalisch relevanten Größen. Die zugehörigen Potentiale φ und $\vec{A}$ sind nicht messbar und lassen sich durch Eichtransformationen beliebig ändern. Über die Lorentz-Kraft $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$ wirken die Felder auf eine Ladung q. Klassisch ist also kein Einfluss eines Feldes in Bereichen mit $\vec{E} = \vec{B} = 0$ auf einen geladenes Teilchen zu erwarten.
1959 zeigten Aharonov und Bohm jedoch, dass sich das Interferenzmuster eines Doppelspaltexperiments ändert, wenn eine unendlich lange Spule zwischen den Teilstrahlen positioniert wird (vgl. Abbildung 3, links). Es tritt also offensichtlich eine Phasenänderung für die Wellenfunktionen der Elektoren auf, obwohl auf Grund der Länge der Spule kein Magnetfeld $\vec{B}$ außerhalb der Spule existiert.



(a) Doppelspaltexperiment mit Spule.[1]



(b) Teilchen, das duch ein Potential $V(\vec{r} - \vec{R})$ auf ein bestimmtes Volumen beschränkt wird. [2]

Abbildung 3: Der Aharonov-Bohm Effekt: Wirkung eines Magnetfeldes auf Ladungen in Bereichen mit $\vec{B} = 0$

Außerhalb der Spule existiert ein magnetisches Potential $\vec{A}(\vec{r})$, das folgende Relation erfüllt:

$$\oint \vec{A}(\vec{r})\, \mathrm{d}\vec{r} = \Phi \tag{16}$$

mit dem magnetischen Fluss Φ durch die Spule. Insbesondere ist für $\Phi \neq 0$ auch $\vec{A} \neq 0$.
Im Folgenden soll gezeigt werden, dass die von Aharonov und Bohm beobachtete Phasenverschiebung als ein spezielles Beispiel für die Berry-Phase angesehen werden kann. Dazu wird das betrachte Teilchen duch ein Potential $V(\vec{r} - \vec{R})$ auf ein bestimmtes Volumen beschränkt (vgl. Abbildung 3, rechts), um es um die Spule herum führen zu können.
Die Schrödingergleichung bei ausgeschaltetem Magnetfeld ($\vec{B} = \vec{A} = 0$) lautet

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta^2 + V(\vec{r} - \vec{R})\right)\psi_n' = E_n \psi_n'. \tag{17}$$

Wird das Magnetfeld angeschaltet, ist

$$\left(\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\vec{A}(\vec{r})\right)^2 + V(\vec{r}-\vec{R})\right)\psi_n = E_n\psi_n \tag{18}$$

die zugehörige Gleichung. Durch Einsetzen kann man leicht zeigen, dass die folgende Wellenfunktion ψ_n Gleichung (18) löst:

$$\psi_n = e^{i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\,\psi_n' \tag{19}$$

mit den Eigenzuständen ψ_n' aus (17) und

$$\Lambda(\vec{r},\vec{R}) = \int_{\vec{R}}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}')\,d\vec{r}'. \tag{20}$$

Nun kann die Berry-Phase

$$\gamma_n(T) = i\oint \langle\psi_n|\nabla_{\vec{R}}\,\psi_n\rangle\cdot d\vec{R} \tag{21}$$

berechnet werden. Dazu errechne zunächst:

$$\begin{aligned}
\nabla_{\vec{R}}\psi_n &= \nabla_{\vec{R}}\left(e^{i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\,\psi_n'(\vec{r}-\vec{R})\right)\\
&= -i\frac{q}{\hbar}\vec{A}(\vec{R})e^{i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\,\psi_n'(\vec{r}-\vec{R}) + e^{i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\,\nabla_{\vec{R}}\psi_n'(\vec{r}-\vec{R}) \qquad (22)\\
\Rightarrow\quad \langle\psi_n|\nabla_{\vec{R}}\psi_n\rangle &= \int e^{-i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\,\psi_n'^{*}(\vec{r}-\vec{R})\Big(-i\frac{q}{\hbar}\vec{A}(\vec{R})e^{i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\,\psi_n'(\vec{r}-\vec{R}) + e^{i\frac{q}{\hbar}\Lambda}\,\nabla_{\vec{R}}\,\psi_n'(\vec{r}-\vec{R})\Big)\,d^3r\\
&= -i\frac{q}{\hbar}\vec{A}(\vec{R}) - \int \psi_n'^{*}(\vec{r}-\vec{R})\,\nabla_{\vec{R}}\,\psi_n'(\vec{r}-\vec{R})\,d^3\vec{r}\\
&= -i\frac{q}{\hbar}\vec{A}(\vec{R}) \qquad (23)
\end{aligned}$$

Das Integral in (23) fällt weg, da der Erwartungswert für den Impuls in einem Eigenzustand des Hamiltonoperators aus (2.4) null ist. Damit ist das Berry-Potential $\langle\psi_n|\nabla_{\vec{R}}\psi_n\rangle$ bis auf einen konstanten Faktor gleich dem Vektorpotential $\vec{A}(\vec{R})$. Es folgt für die Berry-Phase

$$\gamma_n(T) = i\oint_C \langle\psi_n|\nabla_{\vec{R}}\,\psi_n\rangle\cdot d\vec{R} = \frac{q}{\hbar}\oint_C \vec{A}(\vec{R})\cdot d\vec{R} = \frac{q\Phi}{\hbar}. \tag{24}$$

Die Berry-Phase ist also nur vom magnetischen Fluss Φ abhängig. Solange C einen geschlossenen Weg um die Spule herum beschreibt, ist die Berry-Phase unabhängig von der Form des Weges. Da in der Quantenmechanik das Vektorpotential $\vec{A}$ als Bestandteil der Schrödingergleichung (vgl. (18)) Einfluss auf die Wahrscheinlichkeitsamplituden besitzt, tritt eine Phasenänderung für Elektronen auch in Bereichen mit $\vec{B} = 0$ auf. Da im Ergebnis (24) nur der magnetische Fluss Φ auftaucht, ist $\vec{A}$ aber weiterhin nicht messbar und die Quantentheorie invariant unter Eichtransformationen.
Die errechnete Berry-Phase in (24) bestätigt das Ergebnis nach Aharonov und Bohm. Damit kann der Aharonov-Bohm Effekt als ein spezielles Beispiel der Berry-Phase angesehen werden.

Literatur

[1] Mathis Brosowsky: "Aharonov-Bohm-Effekt", http://www.thphys.uni-heidelberg.de/ wolschin/qms13_4s.pdf, Zugriff: 18.12.2014.

[2] D. J. Griffiths, Quantenmechanik, 2. Auflage (Pearson, München 2012): Kap. 10 (S. 411-437).

[3] P. Bruno: "Berry phase effects in magnetism". Lecture notes published in "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.

[4] 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.

[5] J. J. Sakurai und J. Napolitano, Modern Quantum Mechanics, 2. Ed. (Pearson / Addison-Wesley, San Francisco 2011): Kap. 5.6 "Hamiltonians with extreme time dependence".