Prof. Dr. Gerd Schön, Dr. Michael Marthaler, Dr. Jens Michelsen **01.02.12**

http://www.tfp.kit.edu/studium-lehre_415.php

Übungsblatt Nr. 12 zur Vorlesung Quantenmechanik II

37 Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Ein Elektron mit Spin $s = \frac{1}{2}$ habe den Bahndrehimpuls $l = 1$. Ermitteln Sie die möglichen Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{S} + \boldsymbol{L}$ und berechnen Sie die zugehörigen Clebsch-Gordan-Koeffizienten.

38 Adiabatische Näherung und Berry-Phase

Betrachten Sie ein System mit einem zeitabhängigen Hamilton-Operator $H(t)$. Das System genügt der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle. \tag{1}$$

Wir können für jeden Zeitpunkt t eine orthonormale Eigenbasis $\{|\psi_n(t)\rangle\}$ finden mit den Eigenschaften

$$H(t)|\psi_n(t)\rangle = E_n(t)|\psi_n(t)\rangle, \qquad \langle\psi_n(t)|\psi_m(t)\rangle = \delta_{nm}. \tag{2}$$

Da die Eigenzustände $|\psi_n(t)\rangle$ eine vollständige Basis darstellen, können wir die Zustände $|\psi(t)\rangle$ aus Gl. (1) in diese entwickeln $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\psi_n(t)\rangle$. Unter Benutzung der Relationen in Gl. (2) findet man

$$i\hbar\frac{d}{dt}c_n(t) = \sum_m \left(E_n(t)\delta_{nm} - \langle\psi_n(t)|i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_m(t)\rangle\right) c_m(t). \tag{3}$$

a) Zeigen Sie, indem Sie für die Eigenwertgleichung (2) die Ableitung bezüglich t bilden und die Orthonormalitätsrelationen benutzen, dass

$$\langle\psi_n(t)|\frac{d}{dt}|\psi_m(t)\rangle = \frac{\langle\psi_n|\frac{dH}{dt}|\psi_m\rangle}{E_m - E_n}, \qquad n \neq m. \tag{4}$$

Die Vernachlässigung dieser Terme in (3) nennen wir die *adiabatische Näherung*.

b) Nehmen Sie an, dass die adiabatische Näherung gerechtfertigt ist, und zeigen Sie, dass die Differentialgleichung (3) die Lösung $c_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(t')}e^{i\gamma_n(t)}c_n(0)$ mit

$$\gamma_n(t) = \int_0^t dt' \langle\psi_n(t')|i\frac{d}{dt'}|\psi_n(t')\rangle \tag{5}$$

hat. Wir bemerken, dass bei der Wahl der Basiszustände $|\psi_n(t)\rangle$ eine gewisse Mehrdeutigkeit existiert: Wir könnten die Basiszustände durch $e^{i\chi_n(t)}|\psi_n(t)\rangle$, mit $\chi_n(t)$ eine beliebige Phase, ersetzen. Wie würde dies $\gamma_n(t)$ und $c_n(t)$ verändern?

Wenn der Hamilton-Operator periodisch ist $H(T) = H(0)$, können wir die Basis aus eindeutigen Zuständen aufbauen, mit $|\psi_n(T)\rangle = |\psi_n(0)\rangle$. Zeigen Sie, dass die Phase $\gamma_n(T)$, definiert modulo 2π, bei Veränderungen der Basis $|\psi_n(t)\rangle \to e^{i\chi_n(t)}|\psi_n(t)\rangle$ mit $\chi_n(T) = \chi_n(0) + 2m\pi$, invariant ist. Unter diesen Umständen nennen wir die Phase $\gamma_n = \gamma_n(T) = \int_0^T dt' \langle\psi_n(t')|i\frac{d}{dt'}|\psi_n(t')\rangle$ eine *Berry-Phase*.

Bitte wenden ...

c) Nehmen wir an, der Hamilton-Operator hängt nur implicit über einen drei-dimensionalen Parameter $\boldsymbol{\lambda}(t)$ von der Zeit ab, $H(t) = H(\boldsymbol{\lambda}(t))$. Für jeden Wert des Parameters $\boldsymbol{\lambda}$ können wir Basiszustände $|\psi_n(\boldsymbol{\lambda})\rangle$ wählen, so dass $H(\boldsymbol{\lambda})|\psi_n(\boldsymbol{\lambda})\rangle = E_n(\boldsymbol{\lambda})|\psi_n(\boldsymbol{\lambda})\rangle$. Bewegt sich der Parameter periodisch mit der Zeit, $\boldsymbol{\lambda}(T) = \boldsymbol{\lambda}(0)$, kann die Berry-Phase durch eine geschlossene Kurve $\mathcal{C}$ in dem drei-dimensionalen Parameter-Raum ausgedrückt werden:

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \int_0^T dt' \langle\psi_n(t')|i\frac{d}{dt'}|\psi_n(t')\rangle = \int_0^T dt' \frac{d\boldsymbol{\lambda}(t')}{dt'} \cdot \langle\psi_n(\boldsymbol{\lambda})|i\partial_{\boldsymbol{\lambda}}|\psi_n(\boldsymbol{\lambda})\rangle = \oint_{\mathcal{C}} d\boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{\mathcal{A}}_n(\boldsymbol{\lambda}) \tag{6}$$

wobei $\boldsymbol{\mathcal{A}}_n(\boldsymbol{\lambda}) = \langle\psi_n(\boldsymbol{\lambda})|i\partial_{\boldsymbol{\lambda}}|\psi_n(\boldsymbol{\lambda})\rangle$. Mittels des Stokes'schen Theorems können wir das Kurvenintegral als ein Flächenintegral ausdrücken

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \oint_{\mathcal{C}} d\boldsymbol{\lambda} \cdot \boldsymbol{\mathcal{A}}_n(\boldsymbol{\lambda}) = \int_{\mathcal{S}} d\boldsymbol{\mathcal{S}} \cdot [\partial_{\boldsymbol{\lambda}} \times \boldsymbol{\mathcal{A}}_n(\boldsymbol{\lambda})] = \int_{\mathcal{S}} d\boldsymbol{\mathcal{S}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{B}}_n(\boldsymbol{\lambda}) \tag{7}$$

Hier ist $\mathcal{S}$ die von der geschlossenen Kurve $\mathcal{C}$ eingeschlossene Fläche, $d\boldsymbol{\mathcal{S}}$ ist das Flächen-Element und $\boldsymbol{\mathcal{B}}_n(\boldsymbol{\lambda}) = \partial_{\boldsymbol{\lambda}} \times \boldsymbol{\mathcal{A}}_n(\boldsymbol{\lambda})$ wird das *Berry-Feld* genannt.

Zeigen Sie, dass $\boldsymbol{\mathcal{B}}_n(\boldsymbol{\lambda})$ mittels des Kreuzprodukts geschrieben werden kann als

$$\boldsymbol{\mathcal{B}}_n(\boldsymbol{\lambda}) = \sum_m i\langle\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\Psi_n|\Psi_m\rangle \times \langle\Psi_m|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\Psi_n\rangle = \sum_{m\neq n} i\frac{\langle\Psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}H|\Psi_m\rangle \times \langle\Psi_m|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}H|\Psi_n\rangle}{(E_n - E_m)^2}. \tag{8}$$

Bei der letzten Gleichung sollten Sie die Relation $\langle\psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\psi_m\rangle = \langle\psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}H|\psi_m\rangle/(E_m - E_n)$ benutzen, die analog wie in Teilaufgabe a) von der Eigenwertgleichung hergeleitet werden kann.

39 Berry-Phase für Spin-$\frac{1}{2}$ im zeitabhängigen Magnetfeld

Betrachten Sie den Hamilton-Operator für einen Spin-$\frac{1}{2}$ im Magnetfeld $\boldsymbol{B}(t)$, $H = -\mu_e\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{B}(t)$ mit dem magnetischen Moment μ_e. Das Magnetfeld bewege sich während des Zeitintervalls $[0, T]$ adiabatisch entlang einer geschlossenen Kurve $\mathcal{C}$. Wir können dann das Magnetfeld $\boldsymbol{B}(t)$ als Parameter $\boldsymbol{\lambda}(t)$ auffassen. Der Hamilton-Operator ist dann nur implizit zeitabhängig über $\boldsymbol{B}(t)$. Die beiden stationären Spin-Eigenvektoren zum Hamilton-Operator $H(\boldsymbol{B}) = -\mu_e\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{B}$ seien mit $|\psi_\pm(\boldsymbol{B})\rangle$ bezeichnet. Die Eigenwerte sind $E_\pm(\boldsymbol{B}) = \mp\mu_e B$, mit $B = |\boldsymbol{B}|$.

a) Zeigen Sie unter Verwendung von Gl. (8), dass das Berry-Feld durch

$$\boldsymbol{\mathcal{B}}_\pm(\boldsymbol{B}) = \mp\frac{\boldsymbol{n}}{2B^2}, \qquad \boldsymbol{n} = \frac{\boldsymbol{B}}{B} \tag{9}$$

gegeben ist. Leiten Sie daraus die Berry-Phase $\gamma_\pm(\mathcal{C})$ her, und zeigen Sie, dass ihr Betrag durch den halben Raumwinkel gegeben wird, den die Kurve $\boldsymbol{B}(t)$ vom Koordinatenursprung $\boldsymbol{B} = 0$ aus gesehen aufspannt. [Hinweis: Das Flächenelement ist durch $d\boldsymbol{\mathcal{S}} = \boldsymbol{n}d\mathcal{S} = \boldsymbol{n}B^2 d\Omega$ gegeben.]

b) Nehmen wir an, das Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen wurde am Zeitpunkt $t = 0$ in einen Zustand $|\psi_0\rangle = c_+(0)|\psi_+^0\rangle + c_-(0)|\psi_-^0\rangle$ präpariert, wobei $c_+(0) = c_-(0) = 1/\sqrt{2}$ und die Zustände $|\psi_\pm^0\rangle$ Eigenzustände des Hamilton-Operators $H(t = 0) = -\mu_e\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{B}(0)$ mit $\boldsymbol{B}(0) = B\boldsymbol{e}_z$ sind. Das Magnetfeld wird danach adiabatisch und mit konstanter Grösse während des Zeitintervalls $[0, T]$ entlang der Kurve $\mathcal{C} : B\boldsymbol{e}_z \to B\boldsymbol{e}_x \to B\boldsymbol{e}_y \to B\boldsymbol{e}_z$ bewegt. Berechnen Sie, anhand des Raumwinkels $\Omega(\mathcal{C})$, die Erwartungswerte $\langle\sigma_i\rangle$, $i = x, y, z$ für die Zeitpunkte $t = 0$ und $t = T$.