Übungsblatt 12: Lösungen

February 9, 2012

37 **Clebsch-Gordan-Koeffizienten**

Wir sollen die möglichen Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$, die wir mit $|j,m\rangle$ bezeichnen, finden. Das Teilchen hat Bahndrehimpuls l und Spin $s = \frac{1}{2}$, d.h. wir haben als Basiszustände $|l,m_l\rangle|s,m_s\rangle$ mit l und $s = \frac{1}{2}$ fixiert. Um die Notation etwas zu vereinfachen benutzen wir

$$|m_l, m_s\rangle \equiv |l,m_l\rangle|s,m_s\rangle, \qquad -l < m_l < l, \qquad -s < m_s < s, \quad l = 1,\ s = \tfrac{1}{2}. \tag{1}$$

Aus diesen Basiszuständen wollen wir Linearkombinationen

$$|j,m\rangle = \sum_{m_l=-l}^{l}\sum_{m_s=-s}^{s} \langle m_l, m_s|j,m\rangle|m_l,m_s\rangle = \sum_{m_l=-l}^{l}\sum_{m_s=-s}^{s} C(j,m|m_l,m_s)\,|m_l,m_s\rangle \tag{2}$$

konstruieren die Eigenzustände von $\boldsymbol{J}^2$ und J_z sind.

Kleine wiederholung:

Für die Basiszustände haben wir (von hieraus werde ich $\hbar = 1$ nehmen da in der Berechnung der C.G.-Koeffizienten die $\hbar$ sich am ende sowieso gegenseitig ausnehmen.)

$$\boldsymbol{L}^2|m_l,m_s\rangle = l(l+1)|m_l,m_s\rangle, \qquad L_z|m_l,m_s\rangle = m_l|m_l,m_s\rangle \tag{3}$$

und

$$\boldsymbol{S}^2|m_l,m_s\rangle = s(s+1)|m_l,m_s\rangle, \qquad S_z|m_l,m_s\rangle = m_s|m_l,m_s\rangle \tag{4}$$

Ausserdem haben wir

$$\begin{aligned} L_+|m_l,m_s\rangle &= \sqrt{(l-m_l)(l+m_l+1)}|m_l+1,m_s\rangle, \\ L_-|m_l,m_s\rangle &= \sqrt{(l+m_l)(l-m_l+1)}|m_l-1,m_s\rangle, \end{aligned} \tag{5}$$

und

$$\begin{aligned} S_+|m_l,m_s\rangle &= \sqrt{(s-m_s)(s+m_s+1)}|m_l,m_s+1\rangle, \\ S_-|m_l,m_s\rangle &= \sqrt{(s+m_s)(s-m_s+1)}|m_l,m_s-1\rangle, \end{aligned} \tag{6}$$

Der Extremalzustand, definiert durch $J_+|j_{\max},m_{\max}\rangle = 0$, wobei $J_+ = L_+ + S_+$ ist gegeben durch

$$|j_{\max},m_{\max}\rangle = |m_l = l, m_s = s\rangle \tag{7}$$

mit dem Eigenwert

$$\begin{aligned} J_z|j_{\max}, m_{\max}\rangle &= (L_z + S_z)|m_l = l, m_s = s\rangle \\ &= (l+s)|m_l = l, m_s = s\rangle \\ &= (l+s)|j_{\max}, m_{\max}\rangle \\ &= m_{\max}|j_{\max}, m_{\max}\rangle \end{aligned} \tag{8}$$

Also $m_{\max} = l + s$ und

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}^2|j_{\max}, m_{\max}\rangle &= (\boldsymbol{L} + \boldsymbol{S})^2|m_l = l, m_s = s\rangle \\ &= (\boldsymbol{L}^2 + \boldsymbol{S}^2 + 2\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})|m_l = l, m_s = s\rangle \\ &= (\boldsymbol{L}^2 + \boldsymbol{S}^2 + L_+S_- + L_-S_+ + 2L_zS_z)|m_l = l, m_s = s\rangle \\ &= (\boldsymbol{L}^2 + \boldsymbol{S}^2 + 2L_zS_z)|m_l = l, m_s = s\rangle \\ &= (l(l+1) + s(s+1) + 2ls)\,|j_{\max}, m_{\max}\rangle \\ &= (l+s)\,((l+s)+1)\,|j_{\max}, m_{\max}\rangle \\ &= j_{\max}(j_{\max}+1)|j_{\max}, m_{\max}\rangle \end{aligned} \tag{9}$$

also $j_{\max} = m_{\max} = l + s$.

Wir können nun den Zustand $|j_{\max}, m_{\max} - 1\rangle = |l+s, l+s-1\rangle$ bekommen indem wir die Relation

$$J_-|j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j, m-1\rangle \quad \Rightarrow \quad J_-|j_{\max}, j_{\max}\rangle = \sqrt{2(l+s)}|j_{\max}, j_{\max}-1\rangle \tag{10}$$

zusammen mit $J_- = L_- + S_-$ benutzen:

$$\begin{aligned} J_-|j_{\max}, j_{\max}\rangle &= (L_- + S_-)|m_l = l, m_s = s\rangle \\ &= \sqrt{2l}|m_l = l-1, m_s = s\rangle + \sqrt{2s}|m_l = l, m_s = s-1\rangle \end{aligned} \tag{11}$$

Vergleichen wir die Gleichungen (22) und (11) so haben wir

$$|j_{\max}, j_{\max}-1\rangle = \sqrt{\frac{l}{l+s}}|m_l = l-1, m_s = s\rangle + \sqrt{\frac{s}{l+s}}|m_l = l, m_s = s-1\rangle \tag{12}$$

Das Ganze können wir wiederholen bis $m = -j_{\max}$. Danach haben wir alle Zustände

$$|j_{\max}, m\rangle, \qquad -j_{\max} \leq m \leq j_{\max}. \tag{13}$$

Als nächstes will man dann die Zustände $|j_{\max} - 1, m\rangle$ bekommen wobei $-|j_{\max} - 1| \leq m \leq j_{\max} - 1$. Durch $m = m_l + m_s$ sehen wir dass der maximale wert $m = j_{\max} - 1 = l + s - 1$ muss eine Linearkombination von $|m_l = l, m_s = s-1\rangle$ und $|m_l = l-1, m_s = s\rangle$. Dieser Zustand muss orthogonal sein zu $|j_{\max}, j_{\max} - 1\rangle$. Schreiben wir den zustand als

$$|j_{\max}-1, j_{\max}-1\rangle = \alpha|m_l = l-1, m_s = s\rangle + \beta|m_l = l, m_s = s-1\rangle \tag{14}$$

mit $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ als Normalisierung, so haben wir für das skalarprodukt

$$0 = \langle j_{\max}, j_{\max}-1|j_{\max}-1, j_{\max}-1\rangle = \alpha\sqrt{\frac{l}{l+s}} + \beta\sqrt{\frac{s}{l+s}} \tag{15}$$

Dies hat die Lösung $\beta = -\sqrt{l/s}\ \alpha$. Die Normalisierung verlangt dann $1 = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = |\alpha|^2(s+l)/s$, oder[1] $\alpha = \sqrt{s/(l+s)}$ und $\beta = -\sqrt{l/(l+s)}$. Also haben wir

$$|j_{\max}-1, j_{\max}-1\rangle = \sqrt{\frac{s}{l+s}}|m_l = l-1, m_s = s\rangle + \sqrt{\frac{l}{l+s}}|m_l = l, m_s = s-1\rangle \tag{16}$$

Von diesem Zustand können wir dann durch Anwendung von J_- wie vorhin die Zustände

$$|j_{\max}-1, m\rangle, \qquad -(j_{\max}-1) \leq m \leq (j_{\max}-1) \tag{17}$$

bekommen. Danach gehen wir analog für die zustände $|j_{\max}-2, m\rangle$ vor, und so weiter. Nach ein Paar Iterationen kommen wir zu einem $j = j_{\min}$, wonach die konstruierten Zustände den gesamten Hilbertraum aufspannen. Die Dimension des Hilbert-Raums (die Anzahl der Basiszustände) können wir von der Basis $|m_l, m_s\rangle$ bekommen: Da $-l \leq m_l \leq l$ und $-s \leq m_s \leq s$ ist die Dimension $(2l+1)\times(2s+1)$. Wir müssen die selbe Anzahl Basiszustände $|j,m\rangle$ haben. Da wir für jedes $j_{\min} \leq j \leq j_{\max}$ $2j+1$ Zustände haben, müssen wir also auch haben, dass

$$\begin{aligned}(2l+1)(2s+1) = \sum_{j_{\min}}^{j_{\max}}(2j+1) &= \sum_{j_{\min}}^{j_{\max}}\left((j+1)^2 - j^2\right) = \sum_{j_{\min}}^{j_{\max}}(j+1)^2 - \sum_{j_{\min}}^{j_{\max}} j^2 \\ &= \sum_{j_{\min}+1}^{j_{\max}+1}(j')^2 - \sum_{j_{\min}}^{j_{\max}} j^2 = (j_{\max}+1)^2 - j_{\min}^2 + \sum_{j_{\min}}^{j_{\max}} j^2 - \sum_{j_{\min}}^{j_{\max}} j^2 \\ &= (j_{\max}+1)^2 - (j_{\min})^2\end{aligned} \tag{18}$$

mit $j_{\max} = l+s$ gibt dass dann $j_{\min}^2 = (l-s)^2$, oder $j_{\min} = |l-s|$.

Auf die vorgeschriebene Art können wir also die ganze Basis

$$|j,m\rangle, \qquad |l-s| \leq j \leq l+s, \qquad -j \leq m \leq j \tag{19}$$

aufbauen.

Aufgabe:

Wir benutzen hierfür die Relationen

$$L_-|m_l, m_s\rangle = \sqrt{(l+m_l)(l-m_l+1)}|m_l-1, m_s\rangle, \tag{20}$$

$$S_-|m_l, m_s\rangle = \sqrt{(s+m_s)(s-m_s+1)}|m_l, m_s-1\rangle, \tag{21}$$

und

$$J_-|j,m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j, m-1\rangle \tag{22}$$

zusammen mit $J_- = L_- + S_-$.

Wir fangen an mit dem extremalen Zustand $|j = \frac{3}{2}, m = \frac{3}{2}\rangle$ (definiert durch $J_+|j_{\max}, m_{\max}\rangle = 0$, hier gegeben durch $j_{\max} = m_{\max} = l+s = 1+\frac{1}{2} = \frac{3}{2}$). Dieser Zustand ist eindeutig gegeben durch

$$|j = \tfrac{3}{2}, m = \tfrac{3}{2}\rangle = |m_l = 1, m_s = \tfrac{1}{2}\rangle \tag{23}$$

[1] Hier wurde die beliebige globale Phase so gewählt, dass α und β real sind.

Wirken wir auf diesen Zustand mit J_- bekommen wir einerseits

$$J_-|j=\tfrac{3}{2},m=\tfrac{3}{2}\rangle=\sqrt{3}|j=\tfrac{3}{2},m=\tfrac{1}{2}\rangle \tag{24}$$

und anderseits mit $J_-=L_-+S_-$

$$(L_-+S_-)|m_l=1,m_s=\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{2}|m_l=0,m_s=\tfrac{1}{2}\rangle+|m_l=1,m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle \tag{25}$$

Also haben wir

$$\boxed{|j=\tfrac{3}{2},m=\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|m_l=0,m_s=\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{1}{3}}|m_l=1,m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle} \tag{26}$$

Wirken wir noch einmal mit J_- auf diesen Zustand haben wir einerseits

$$J_-|j=\tfrac{3}{2},m=\tfrac{1}{2}\rangle=2|j=\tfrac{3}{2},m=-\tfrac{1}{2}\rangle \tag{27}$$

und anderseits mit $J_-=L_-+S_-$

$$\begin{aligned}(L_-+S_-)|j=\tfrac{3}{2},m=\tfrac{1}{2}\rangle&=(L_-+S_-)\left(\sqrt{\frac{2}{3}}|m_l=0,m_s=\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{1}{3}}|m_l=1,m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle\right)\\&=\sqrt{\frac{2}{3}}(L_-+S_-)|m_l=0,m_s=\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{1}{3}}L_-|m_l=1,m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle\\&=\sqrt{\frac{4}{3}}|m_l=-1,m_s=\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}|m_l=0,m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}|m_l=0,m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle\\&=\frac{2}{\sqrt{3}}|m_l=-1,m_s=\tfrac{1}{2}\rangle+2\sqrt{\frac{2}{3}}|m_l=0,m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle\end{aligned} \tag{28}$$

Also haben wir

$$\boxed{|j=\tfrac{3}{2},m=-\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{1}{3}}|m_l=-1,m_s=\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}|m_l=0,m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle} \tag{29}$$

Wenden wir J_- ein letztes mal an haben wir einerseits

$$J_-|j=\tfrac{3}{2},m=-\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{3}|j=\tfrac{3}{2},m=-\tfrac{3}{2}\rangle \tag{30}$$

und anderseits mit $J_-=L_-+S_-$

$$\begin{aligned}(L_-+S_-)|j=\tfrac{3}{2},m=\tfrac{1}{2}\rangle&=(L_-+S_-)\left(\sqrt{\frac{1}{3}}|m_l=-1,m_s=\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}|m_l=0,m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle\right)\\&=\sqrt{\frac{1}{3}}S_-|m_l=-1,m_s=\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}L_-|m_l=0,m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle\\&=\sqrt{\frac{1}{3}}|m_l=-1,m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{4}{3}}|m_l=-1,m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle\\&=\sqrt{3}|m_l=-1,m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle\end{aligned} \tag{31}$$

Also haben wir

$$\boxed{|j=\tfrac{3}{2}, m=-\tfrac{1}{2}\rangle = |m_l=-1, m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle} \tag{32}$$

Als nächstes sehen wir uns dann die Zustände $|j=\frac{1}{2}, m\rangle$ an. Das grösste m ist $m=\frac{1}{2}$. Der Zustand $|j=\frac{1}{2}, m=\frac{1}{2}\rangle$ muss dann eine Linearkombination von $|m_l=1, m_s=-\frac{1}{2}\rangle$ und $|m_l=0, m_s=\frac{1}{2}\rangle$ sein. Schreiben wir dies als

$$|j=\tfrac{1}{2}, m=\tfrac{1}{2}\rangle = \alpha|m_l=1, m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle + \beta|m_l=0, m_s=\tfrac{1}{2}\rangle \tag{33}$$

Dieser Zustand muss orthogonal sein zu $|j=\frac{3}{2}, m=\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|m_l=0, m_s=\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|m_l=1, m_s=-\frac{1}{2}\rangle$:

$$0 = \langle j=\tfrac{3}{2}, m=\tfrac{1}{2}|j=\tfrac{1}{2}, m=\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}\beta \tag{34}$$

also $\beta = -\frac{1}{\sqrt{2}}\alpha$ und mit $\alpha^2+\beta^2=1$ haben wir

$$\boxed{|j=\tfrac{1}{2}, m=\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|m_l=1, m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|m_l=0, m_s=\tfrac{1}{2}\rangle} \tag{35}$$

Wenden wir dann J_- an, haben wir einerseits

$$J_-|j=\tfrac{1}{2}, m=\tfrac{1}{2}\rangle = |j=\tfrac{1}{2}, m=-\tfrac{1}{2}\rangle \tag{36}$$

und andererseits

$$\begin{aligned}
(L_-+S_-)|j=\tfrac{1}{2}, m=\tfrac{1}{2}\rangle &= (L_-+S_-)\left(\sqrt{\frac{2}{3}}|m_l=1, m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|m_l=0, m_s=\tfrac{1}{2}\rangle\right) \\
&= \sqrt{\frac{2}{3}}L_-|m_l=1, m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}(L_-+S_-)|m_l=0, m_s=\tfrac{1}{2}\rangle \\
&= \sqrt{\frac{4}{3}}|m_l=0, m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|m_l=-1, m_s=\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|m_l=0, m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle \\
&= \sqrt{\frac{1}{3}}|m_l=0, m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|m_l=-1, m_s=\tfrac{1}{2}\rangle
\end{aligned} \tag{37}$$

Also haben wir

$$\boxed{|j=\tfrac{1}{2}, m=-\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|m_l=0, m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|m_l=-1, m_s=\tfrac{1}{2}\rangle} \tag{38}$$

Die Clebsch-Gordan Koeffizienten $C(j,m|m_l,m_s)$ lassen sich nun direkt ablesen von den Gleichungen (26),(29),(35) und (38) bei vergleich mit Gl. (2).

$\boxed{38}$ Adiabatische Näherung und Berry-Phase

a) Wir haben die Eigenwertgleichung

$$H(t)|\psi_n(t)\rangle = E_n(t)|\psi_n(t)\rangle \tag{39}$$

Ableitung bezüglich t gibt

$$\frac{dH}{dt}|\psi_m\rangle + H\frac{d}{dt}|\psi_m\rangle = \frac{dE_m}{dt}|\psi_m\rangle + E_m\frac{d}{dt}|\psi_m\rangle \tag{40}$$

Nehmen wir das Skalarprodukt mit $\langle\psi_n|$ und benutzen die Orthogonalitätsrelationen $\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm}$, haben wir

$$\langle\psi_n|\frac{dH}{dt}|\psi_m\rangle + E_n\langle\psi_n|\frac{d}{dt}|\psi_m\rangle = \frac{dE_m}{dt}\delta_{nm} + E_m\langle\psi_n|\frac{d}{dt}|\psi_m\rangle \tag{41}$$

welches für[2] $n \neq m$ führt dies zu

$$\langle\psi_n|\frac{d}{dt}|\psi_m\rangle = \frac{\langle\psi_n|\frac{dH}{dt}|\psi_m\rangle}{E_m - E_n} \tag{42}$$

Von der Form des Ausdrucks sehen wir dass die adiabatische Näherung für grosse Energielücken und zeitlich langsam varierenden Hamilton-Operatoren nützlich ist.

b) Nehmen wir an, dass die adiabatische Näherung gerechtfertigt ist, haben wir die Differentialgleichung

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{dc_n}{dt} &= \left(E_n(t) - \hbar\langle\psi_n|i\frac{d}{dt}|\psi_n\rangle\right)c_n(t) \\
\Rightarrow \int_{c_n(0)}^{c_n(t)} dc_n'\frac{1}{c_n'} &= -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(t') + \int_0^t dt'\langle\psi_n|i\frac{d}{dt}|\psi_n\rangle \\
\Rightarrow \frac{c_n(t)}{c_n(0)} &= e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(t')}e^{i\gamma_n(t)}
\end{aligned} \tag{43}$$

welches das gesuchte Ergebnis $c_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(t')}e^{i\gamma_n(t)}c_n(0)$ mit

$$\gamma_n(t) = \int_0^t dt'\langle\psi_n(t')|i\frac{d}{dt'}|\psi_n(t')\rangle \tag{44}$$

gibt.

Ersetzen wir die Basiszustände durch $e^{i\chi(t)}|\psi_n(t)\rangle$, bekommen wir für $\gamma_n(t)$:

$$\begin{aligned}
\gamma_n(t) \rightarrow &\int_0^t dt'\langle\psi_n(t')|e^{-i\chi(t')}i\frac{d}{dt'}\left(e^{i\chi_n(t')}|\psi_n(t')\rangle\right) \\
&= \int_0^t dt'\langle\psi_n(t')|i\frac{d}{dt'}|\psi_n(t')\rangle + \int_0^t dt'\langle\psi_n(t')|\left(-\frac{d\chi_n}{dt'}\right)|\psi_n(t')\rangle \\
&= \gamma_n(t) - \int_0^t dt'\frac{d\chi_n}{dt'} \\
&= \gamma_n(t) - (\chi_n(t) - \chi_n(0))
\end{aligned} \tag{45}$$

[2] Für $n = m$ führt dies zu $\langle\psi_n|\frac{dH}{dt}|\psi_n\rangle = \frac{dE_n}{dt}$

Einsetzen in die Gleichung für $c_n(t) \to e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(t')} e^{i\gamma_n(t)} e^{-i(\chi_n(t)-\chi_n(0))} c_n(0)$, d.h. die Koeffizienten bekommen einen extra Phasenfaktor $c_n(t) \to c_n(t)e^{-i(\chi_n(t)-\chi_n(0))}$. Wenn der Hamilton-Operator periodisch ist, und wir die Basiszustände eindeutig wählen können, müssen $\chi_n(T) = \chi_n(0) + 2m\pi$ und der Phasenfaktor verschwindet.

c) Das Berry-Feld ist gegeben durch

$$\boldsymbol{\mathcal{B}}_n = \partial_{\boldsymbol{\lambda}} \times \boldsymbol{\mathcal{A}}_n \tag{46}$$

Schreiben wir dies für jede Komponente auf, haben wir

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\mathcal{B}}_n)_k &= \epsilon_{ijk}\partial_{\lambda_i}(\boldsymbol{\mathcal{A}}_n)_j = i\epsilon_{ijk}\partial_{\lambda_i}\langle\psi_n|\partial_{\lambda_j}\psi_n\rangle = i\epsilon_{ijk}\langle\partial_{\lambda_i}\psi_n|\partial_{\lambda_j}\psi_n\rangle \\ &= \sum_m i\epsilon_{ijk}\langle\partial_{\lambda_i}\psi_n|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\partial_{\lambda_j}\psi_n\rangle = \left(i\sum_m\langle\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\psi_n|\psi_m\rangle \times \langle\psi_m|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\psi_n\rangle\right)_k\end{aligned} \tag{47}$$

Benutzen wir dann, dass

$$0 = \partial_{\boldsymbol{\lambda}}(\delta_{nm}) = \partial_{\boldsymbol{\lambda}}(\langle\psi_n|\psi_m\rangle) = \langle\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\psi_n|\psi_m\rangle + \langle\psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\psi_m\rangle \tag{48}$$

und deswegen $\langle\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\psi_n|\psi_m\rangle = -\langle\psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\psi_m\rangle$, haben wir

$$\boldsymbol{\mathcal{B}}_n = -i\sum_m\langle\psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\psi_m\rangle \times \langle\psi_m|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\psi_n\rangle = -i\sum_{m\neq n}\langle\psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\psi_m\rangle \times \langle\psi_m|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\psi_n\rangle \tag{49}$$

wobei wir in der letzten Gleichung die Vektorrelation $\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{a} = 0$ benutzt haben, d.h. $\langle\psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\psi_n\rangle \times \langle\psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\psi_n\rangle = 0$. Für den letzten schritt zeigen wir noch kurz die herleitung der Relation $\langle\psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\psi_m\rangle = \langle\psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}H|\psi_m\rangle/(E_m - E_n)$

$$\begin{aligned} H(\boldsymbol{\lambda})|\psi_m(\boldsymbol{\lambda})\rangle &= E_m(\boldsymbol{\lambda})|\psi_m(\boldsymbol{\lambda})\rangle \\ \Rightarrow (\partial_{\boldsymbol{\lambda}}H)|\psi_m\rangle + H\partial_{\boldsymbol{\lambda}}|\psi_m\rangle &= (\partial_{\boldsymbol{\lambda}}E_m)|\psi_m\rangle + E_m\partial_{\boldsymbol{\lambda}}|\psi_m\rangle \\ \Rightarrow \langle\psi_n|(\partial_{\boldsymbol{\lambda}}H)|\psi_m\rangle + E_n\langle\psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}|\psi_m\rangle &= (\partial_{\boldsymbol{\lambda}}E_m)\delta_{nm} + E_m\langle\psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}|\psi_m\rangle \end{aligned} \tag{50}$$

analog wie in Aufgabenteil a). Für $n \neq m$ haben wir dann $\langle\psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}\psi_m\rangle = \langle\psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}H|\psi_m\rangle/(E_m - E_n)$ welches nach Einsetzung in (49) gibt die gesuchte Form des Berry-Feldes

$$\boldsymbol{\mathcal{B}}_n = \sum_{m\neq n} i\frac{\langle\Psi_n|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}H|\Psi_m\rangle \times \langle\Psi_m|\partial_{\boldsymbol{\lambda}}H|\Psi_n\rangle}{(E_n - E_m)^2}. \tag{51}$$

$\boxed{39}$ **Berry-Phase für Spin-$\frac{1}{2}$ im zeitabhängigen Magnetfeld** Der Hamilton-Operator ist gegeben durch $H(\boldsymbol{B}) = -\mu_e\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$. Die Basiszustände sind $|\psi_\pm(\boldsymbol{B})\rangle$ mit $H(\boldsymbol{B})|\psi_\pm(\boldsymbol{B})\rangle = E_\pm(\boldsymbol{B})|\psi_\pm(\boldsymbol{B})\rangle$ und $E_\pm(\boldsymbol{B}) = \mp\mu_e B$.

a) Das Berry-Feld ist gegenen durch

$$\boldsymbol{\mathcal{B}}_+ = i\frac{\langle\Psi_+|\partial_{\boldsymbol{B}}H|\Psi_-\rangle \times \langle\Psi_-|\partial_{\boldsymbol{B}}H|\Psi_+\rangle}{(E_+ - E_-)^2}. \tag{52}$$

und

$$\boldsymbol{\mathcal{B}}_- = i\frac{\langle\Psi_-|\partial_{\boldsymbol{B}}H|\Psi_+\rangle \times \langle\Psi_+|\partial_{\boldsymbol{B}}H|\Psi_-\rangle}{(E_- - E_+)^2}. \tag{53}$$

Wir haben

$$\partial_{\boldsymbol{B}} H = -\mu_e \boldsymbol{\sigma}, \quad \text{und} \quad (E_+ - E_-)^2 = (2\mu_e B)^2, \tag{54}$$

und somit

$$\boldsymbol{\mathcal{B}}_+ = -\boldsymbol{\mathcal{B}}_- = \frac{1}{4B^2} i \langle \psi_+ | \boldsymbol{\sigma} | \psi_- \rangle \times \langle \psi_- | \boldsymbol{\sigma} | \psi_+ \rangle = \frac{1}{4B^2} i \epsilon_{ijk} \langle \psi_+ | \sigma_i | \psi_- \rangle \langle \psi_- | \sigma_j \psi_+ \rangle. \tag{55}$$

benutzen wir dann $\mathbb{1} = |\psi_+\rangle\langle\psi_+| + |\psi_-\rangle\langle\psi_-|$ oder anders geschrieben $|\psi_-\rangle\langle\psi_-| = \mathbb{1} - |\psi_+\rangle\langle\psi_+|$ haben wir

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\mathcal{B}}_+ = -\boldsymbol{\mathcal{B}}_- &= \frac{1}{4B^2} i \epsilon_{ijk} \langle \psi_+ | \sigma_i | \psi_- \rangle \langle \psi_- | \sigma_j \psi_+ \rangle \\
&= \frac{1}{4B^2} i \epsilon_{ijk} \langle \psi_+ | \sigma_i \sigma_j | \psi_+ \rangle + \frac{1}{4B^2} i \epsilon_{ijk} \langle \psi_+ | \sigma_i | \psi_+ \rangle \langle \psi_+ | \sigma_j | \psi_+ \rangle \\
&= -\frac{1}{2B^2} \langle \psi_+ | \boldsymbol{\sigma} | \psi_+ \rangle + \frac{1}{4B^2} i \langle \psi_+ | \boldsymbol{\sigma} | \psi_+ \rangle \times \langle \psi_+ | \boldsymbol{\sigma} | \psi_+ \rangle \\
&= -\frac{1}{2B^2} \boldsymbol{n} + i \frac{1}{4B^2} \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{n}
\end{aligned} \tag{56}$$

Hier haben wir in der vorletzten Gleichung für den ersten Term benutzt, dass $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \epsilon_{ijl} \sigma_l$ und $\epsilon_{ijk} \delta_{ij} = 0$ und $\epsilon_{ijk} \epsilon_{ijl} = 2\delta_{lk}$. In der letzten Gleichung wurde benutzt dass[3] $\langle \psi_+ | \boldsymbol{\sigma} | \psi_+ \rangle = \boldsymbol{n}$ da das Spin immer entlang dem Magnetfeld zeigt.

Benutzen wir wieder die Vektorrelation $\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{n} = 0$ haben wir

$$\boldsymbol{\mathcal{B}}_\pm = \mp \frac{1}{2} \frac{\boldsymbol{n}}{B^2} \tag{57}$$

und die Berry-Phase ist

$$\gamma_\pm(\mathcal{C}) = \int_S d\boldsymbol{\mathcal{S}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{B}}_\pm = \int_S d\mathcal{S} (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\mathcal{B}}_\pm) = \mp \frac{1}{2} \int_\Omega d\Omega \frac{B^2}{B^2} = \mp \frac{1}{2} \Omega(\mathcal{C}). \tag{58}$$

b) In der adiabatischen Näherung haben wir

$$c_\pm(T) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt' E_\pm(t')} e^{i\gamma_\pm(\mathcal{C})} c_\pm(0), \tag{59}$$

In dieser Aufgabe haben wir $E_\pm(t) = \mp \mu_e B$ (zeitunabhängig da B konstant ist) und $\gamma_\pm = \mp \frac{1}{2} \Omega(\mathcal{C})$, also

$$c_\pm(t) = e^{\pm i \frac{\omega}{2} T} e^{\mp i \frac{\Omega(\mathcal{C})}{2}} c_\pm(0), \qquad \hbar\omega = |E_+ - E_-| = 2\mu_e B \tag{60}$$

Die Erwartungswerte sind (für $t = 0, T$)

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_z \rangle &= |c_+(t)|^2 - |c_-(t)|^2, \\
\langle \sigma_x \rangle &= 2\mathrm{Re}\left[c_+^*(t) c_-(t) \right], \\
\langle \sigma_y \rangle &= 2\mathrm{Im}\left[c_+^*(t) c_-(t) \right]
\end{aligned} \tag{61}$$

[3] Dies kann z.B. gezeigt werden durch $-\mu_e B = E_+ = \langle \psi_+ | H | \psi_+ \rangle = -\mu_e \boldsymbol{B} \cdot \langle \psi_+ | \boldsymbol{\sigma} | \psi_+ \rangle = -\mu_e B \boldsymbol{n} \cdot \langle \psi_+ | \boldsymbol{\sigma} | \psi_+ \rangle$ $\Rightarrow 1 = \boldsymbol{n} \cdot \langle \psi_+ | \boldsymbol{\sigma} | \psi_+ \rangle \Rightarrow \langle \psi_+ | \boldsymbol{\sigma} | \psi_+ \rangle = \boldsymbol{n}$

Wir haben dann für $t = 0$ mit $c_+(0) = c_-(0) = 1/\sqrt{2}$

$$t = 0: \qquad \begin{aligned} \langle \sigma_z \rangle &= |c_+(0)|^2 - |c_-(0)|^2 = 0, \\ \langle \sigma_x \rangle &= 2\mathrm{Re}\left[c_+^*(0)c_-(0)\right] = 1, \\ \langle \sigma_y \rangle &= 2\mathrm{Im}\left[c_+^*(0)c_-(0)\right] = 0 \end{aligned} \tag{62}$$

Also dass Spin zeigt eindeutig in die x-Richtung. Für $t = T$ haben wir dann

$$t = T: \qquad \begin{aligned} \langle \sigma_z \rangle &= |c_+(T)|^2 - |c_-(T)|^2 = 0, \\ \langle \sigma_x \rangle &= 2\mathrm{Re}\left[c_+^*(T)c_-(T)\right] = \cos\left(-\omega T + \Omega(\mathcal{C})\right), \\ \langle \sigma_y \rangle &= 2\mathrm{Im}\left[c_+^*(T)c_-(T)\right] = \sin\left(-\omega T + \Omega(\mathcal{C})\right) \end{aligned} \tag{63}$$

Für die gewählte Kurve ist der Raumwinkel $1/8$ von dem vollen Raumwinkel 4π, also $\Omega(\mathcal{C}) = \pi/2$. Wir haben dann

$$t = T: \qquad \begin{aligned} \langle \sigma_z \rangle &= |c_+(T)|^2 - |c_-(T)|^2 = 0, \\ \langle \sigma_x \rangle &= 2\mathrm{Re}\left[c_+^*(T)c_-(T)\right] = \cos\left(-\omega T + \frac{\pi}{2}\right), \\ \langle \sigma_y \rangle &= 2\mathrm{Im}\left[c_+^*(T)c_-(T)\right] = \sin\left(-\omega T + \frac{\pi}{2}\right) \end{aligned} \tag{64}$$