Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Moderne Theoretische Physik II (WS 2024/25)

Prof. Dr. A. Shnirman
Adrian Reich

Lösungen zu Blatt 4
Besprechung 26.11.2024

---

1. Berry-Phase (14 Punkte)

Wir betrachten ein Spin-1/2-Teilchen in einem Magnetfeld $\boldsymbol{B}(t) = B\hat{\boldsymbol{e}}_B(t)$ mit $\hat{\boldsymbol{e}}_B^2(t) = 1$. Der Hamiltonoperator lautet

$$H(t) = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{B}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \tag{1}$$

wobei σ_i die Pauli-Matrizen sind. Die Bewegung des Magnetfeldes sei periodisch mit Periode T, wobei für die Winkel, die die Richtung in Kugelkoordinaten beschreiben, gelte $\varphi(t+T) = \varphi(t) + 2\pi$, $\theta(t+T) = \theta(t)$.

a) Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator (in der Eigenbasis von σ_z) lautet

$$H(t) = \frac{\hbar B}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta(t) & \sin\theta(t)e^{-i\varphi(t)} \\ \sin\theta(t)e^{i\varphi(t)} & -\cos\theta(t) \end{pmatrix}. \quad \text{(1 Punkt)} \tag{2}$$

b) Bestimmen Sie die (instantanen) Eigenzustände $|\!\uparrow(\hat{\boldsymbol{e}}_B(t))\rangle$ und $|\!\downarrow(\hat{\boldsymbol{e}}_B(t))\rangle$ von $H(t)$ zu jedem Zeitpunkt t. Wählen Sie diese so, dass sie ebenfalls periodisch in T sind. (3 Punkte)

c) In der Vorlesung haben Sie gesehen, dass der Hamiltonoperator, der die Zeitentwicklung in der instantanen Eigenbasis beschreibt, gegeben ist durch

$$\tilde{H}(t) = \sum_n E_n |n_0\rangle\langle n_0| + i\hbar\sum_{n,m} |n_0\rangle\langle \dot{n}(t)|m(t)\rangle\langle m_0|. \tag{3}$$

Hier ist $n, m \in \{\uparrow,\downarrow\}$, $n(t) \equiv n(\hat{\boldsymbol{e}}_B(t))$ und $n_0 \equiv n(0)$. Bestimmen Sie seine Diagonalelemente (bzgl. der Basis $\{|\!\uparrow(0)\rangle, \downarrow(0)\}$). (2 Punkte)

d) Wir ignorieren im Folgenden die Nichtdiagonalelemente von $\tilde{H}$ (adiabatische Näherung). Das System werde zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand

$$|\Phi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\!\uparrow(\hat{\boldsymbol{e}}_B(0))\rangle + |\!\downarrow(\hat{\boldsymbol{e}}_B(0))\rangle\big) \tag{4}$$

präpariert. Nach Durchlaufen von einer Periode, befindet sich das System in einem Zustand

$$|\Phi(T)\rangle \propto |\!\uparrow(\hat{\boldsymbol{e}}_B(0))\rangle + e^{-i\gamma(T)}|\!\downarrow(\hat{\boldsymbol{e}}_B(0))\rangle. \tag{5}$$

Identifizieren Sie den Beitrag zur Phasendifferenz $\gamma(T)$, der nicht von der Periodendauer abhängt. Zeigen Sie, dass diese sogenannte Berry-Phase durch den Raumwinkel bestimmt ist, den das Magnetfeld im Laufe seiner Bewegung einschließt. (4 Punkte)

e) Alternativ hätten wir auch direkt die unitäre Matrix $\Omega(t)$ suchen können, sodass $\Omega(t)H(t)\Omega^{-1}(t)$ diagonal ist. Zeigen Sie, dass der Ansatz

$$\Omega(t) = e^{i\frac{\chi(t)}{2}}e^{i\frac{\theta(t)}{2}\sigma_y}e^{i\frac{\varphi(t)}{2}\sigma_z} \tag{6}$$

dies erfüllt. Wählen Sie dann $\chi(t)$ so, dass $\Omega(t) = \Omega(t+T)$ für beliebiges t. (2 Punkte)

f) Bestimmen Sie den Hamiltonoperator in der rotierenden Eigenbasis mithilfe von $\Omega(t)$

$$\tilde{H}(t) = \Omega H \Omega^{-1} + i\hbar\dot{\Omega}\Omega^{-1}, \tag{7}$$

dieses Mal inklusive der Nichtdiagonalelemente. (2 Punkte)

Lösungsvorschlag

a) Wir schreiben in Kugelkoordinaten $\hat{\boldsymbol{e}}_B(t) = (\sin\theta(t)\cos\varphi(t), \sin\theta(t)\sin\varphi(t), \cos\theta(t))^T$. Es folgt

$$H = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \frac{\hbar B}{2}(\sin\theta\cos\varphi\,\sigma_x + \sin\theta\sin\varphi\,\sigma_y + \cos\theta\,\sigma_z) \tag{8}$$

$$= \frac{\hbar B}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta(\cos\varphi - i\sin\varphi) \\ \sin\theta(\cos\varphi + i\sin\varphi) & -\cos\theta\end{pmatrix} = \frac{\hbar B}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}. \tag{9}$$

b) Die Eigenwerte von $H(t)$ lauten $E_{\uparrow,\downarrow} = \pm\hbar B/2$. Die zugehörigen normierten Eigenvektoren sind

$$|\uparrow(t)\rangle = \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta(t)}{2} \\ \sin\frac{\theta(t)}{2}e^{i\varphi(t)}\end{pmatrix}, \quad |\downarrow(t)\rangle = \begin{pmatrix}-e^{-i\varphi(t)}\sin\frac{\theta(t)}{2} \\ \cos\frac{\theta(t)}{2}\end{pmatrix} \tag{10}$$

Sie erfüllen $|n(t+T)\rangle = |n(t)\rangle$.

c) Um die Diagonalelemente zu finden, brauchen wir

$$\langle\partial_t(\uparrow(t))|\uparrow(t)\rangle = \frac{\dot{\theta}}{2}\begin{pmatrix}-\sin\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix} - i\dot{\varphi}\begin{pmatrix}0 \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix} \tag{11}$$

$$= -i\dot{\varphi}\sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{-i\dot{\varphi}}{2}(1-\cos\theta), \tag{12}$$

sowie

$$\langle\partial_t(\downarrow(t))|\downarrow(t)\rangle = \frac{i\dot{\varphi}}{2}(1-\cos\theta). \tag{13}$$

Es ist also

$$\tilde{H}_{\text{diag}} = \frac{\hbar}{2}\left(B + \dot{\varphi}(1-\cos\theta)\right)\sigma_z. \tag{14}$$

Anmerkung: Wenn wir in der "instantanen Eigenbasis" arbeiten, warum berechnen wir die Matrixelemente dann nicht bezüglich $\{n(t)\}$, sondern stattdessen bezüglich $\{n(0)\}$?

Die Terminologie kann hier etwas verwirrend sein. Die unitäre Transformation kann wie folgt verstanden werden: Zunächst drücken wir den Zustand in der instantanen Eigenbasis aus $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\,|n(t)\rangle$. Dies könnten wir direkt in die Schrödingergleichung einsetzen und einen effektiven Hamiltonian für $c_n(t)$ finden. Stattdessen können wir aber auch zunächst unsere Basis zeitunabhängig machen, indem wir den unitären Operator $\Omega(t)$ finden, mit dem gilt $|n(t)\rangle = \Omega^{-1}(t)\,|n(0)\rangle$. Eingesetzt in den Ausdruck für den Zustand und in die Schrödingergleichung folgt dann der effektive Hamiltonoperator in Gl. (3). Diese beiden Schritte fassen wir mit der unitären Transformation, die Sie in der Vorlesung kennenglerent haben und die wir in der Aufgabe durchführen, also zusammen. Da die Komponenten $c_n(t)$, für die wir die effektive Schrödingergleichung finden, aber nach wie vor die Komponenten bezüglich der instantanen Eigenbasis sind, entspricht dies tatsächlich einem "Wechsel in die instantane Eigenbasis", obwohl wir die Matrixelemente bezüglich der Eigenbasis zum Zeitpunkt 0 berechnen.

---

d) Es ist $[\tilde{H}_{\text{diag}}(t), \tilde{H}_{\text{diag}}(t')] = 0$, der Zeitentwicklungsoperator (in der adiabatischen Näherung) lautet also einfach

$$U(t, t_0) = e^{-i \int_{t_0}^{t} dt'\, \tilde{H}_{\text{diag}}(t')/\hbar}. \tag{15}$$

Es ist dann

$$\begin{aligned} |\Phi(T)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(U(T,0) \left|\uparrow(0)\right\rangle + U(T,0) \left|\downarrow(0)\right\rangle \right) && (16) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-\frac{i}{2}(BT + \int_0^T dt'\, \dot{\varphi}(1-\cos\theta))} \left|\uparrow(0)\right\rangle + e^{\frac{i}{2}(BT + \int_0^T dt'\, \dot{\varphi}(1-\cos\theta))} \left|\downarrow(0)\right\rangle \right) && (17) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{i}{2}(BT + \int_0^T dt'\, \dot{\varphi}(1-\cos\theta))} \left(\left|\uparrow(0)\right\rangle + e^{i(BT + \int_0^T dt'\, \dot{\varphi}(1-\cos\theta))} \left|\downarrow(0)\right\rangle \right), && (18) \end{aligned}$$

die Phasendifferenz ist also $\gamma(T) = -BT - \int_0^T dt'\, \dot{\varphi}(1 - \cos\theta))$. Der erste Beitrag ist die übliche (dynamische) Phase. Parametrisieren wir $\theta(t) \equiv \theta(\varphi(t))$, können wir das Integral im zweiten Beitrag schreiben als

$$\int_0^T dt'\, \dot{\varphi}(1 - \cos\theta)) = \int_{\varphi(0)}^{\varphi(T)} d\varphi\, (1 - \cos\theta(\varphi)) = \int_{\varphi(0)}^{\varphi(0)+2\pi} d\varphi\, (1 - \cos\theta(\varphi)). \tag{19}$$

Es ist damit unabhängig von der Periode T und hängt lediglich vom Weg ab, dem die Magnetfeldrichtung gefolgt ist. Dies ist die (geometrische) Berry-Phase. Der Raumwinkel, der von der periodischen Bewegung der Magnetfeldrichtung eingeschlossen wird, ist gegeben durch

$$\int d\Omega = \int_{\varphi(0)}^{\varphi(0)+2\pi} d\varphi \int_0^{\theta(\varphi)} d\theta' \sin\theta' = \int_{\varphi(0)}^{\varphi(0)+2\pi} d\varphi\, (1 - \cos\theta(\varphi)), \tag{20}$$

und entspricht damit genau der Berry-Phase.

e) Es ist

$$\begin{aligned} \Omega\sigma_x\Omega^{-1} &= \cos\theta\cos\varphi\,\sigma_x - \sin\varphi\,\sigma_y + \sin\theta\cos\varphi\,\sigma_z, && (21) \\ \Omega\sigma_y\Omega^{-1} &= \cos\theta\sin\varphi\,\sigma_x + \cos\varphi\,\sigma_y + \sin\theta\sin\varphi\,\sigma_z, && (22) \\ \Omega\sigma_z\Omega^{-1} &= -\sin\theta\,\sigma_x + \cos\theta\,\sigma_z. && (23) \end{aligned}$$

Damit finden wir

$$\begin{aligned} \Omega H \Omega^{-1} = \frac{\hbar B}{2} \Big[&\sin\theta\cos\varphi(\cos\theta\cos\varphi\,\sigma_x - \sin\varphi\,\sigma_y + \sin\theta\cos\varphi\,\sigma_z) + \\ &\sin\theta\sin\varphi(\cos\theta\sin\varphi\,\sigma_x + \cos\varphi\,\sigma_y + \sin\theta\sin\varphi\,\sigma_z) + && (24) \\ &\cos\theta(-\sin\theta\,\sigma_x + \cos\theta\,\sigma_z) \Big] \\ = \frac{\hbar B}{2}\sigma_z. & && (25) \end{aligned}$$

$\Omega H \Omega^{-1}$ ist mit dem gegebenen Ansatz also tatsächlich diagonal. Weiter ist

$$\Omega(t+T) = e^{i\frac{\chi(t+T)}{2}} e^{i\frac{\theta(t)}{2}\sigma_y} e^{i\frac{\varphi(t)}{2}\sigma_z} e^{i\pi\sigma_z} \overset{!}{=} e^{i\frac{\chi(t)}{2}} e^{i\frac{\theta(t)}{2}\sigma_y} e^{i\frac{\varphi(t)}{2}\sigma_z}. \tag{26}$$

Da

$$e^{i\pi\sigma_z} = \cos\pi + i\sin\pi\sigma_z = -1, \tag{27}$$

soll gelten $\chi(t+T) = \chi(t) + 2\pi$. Jede (glatte) Funktion, die dies erfüllt, ist hier eine legitime Wahl, am bequemsten ist jedoch $\chi(t) = \varphi(t)$.

f) Es gilt nun

$$i\hbar\dot{\Omega}\Omega^{-1} = -\frac{\hbar}{2}\left(\dot{\varphi} + \dot{\theta}\sigma_y + \dot{\varphi}\Omega\sigma_z\Omega^{-1}\right) = -\frac{\hbar}{2}\left(\dot{\varphi}(1+\cos\theta\,\sigma_z - \sin\theta\sigma_x) + \dot{\theta}\sigma_y\right). \tag{28}$$

Die Diagonalelemente von $\tilde{H}$ sind hier andere als in Teilaufgabe c)

$$\tilde{H}_{\text{diag}} = \frac{\hbar}{2}\left(B - \dot{\varphi}\cos\theta\right)\sigma_z - \frac{\hbar\dot{\varphi}}{2}, \tag{29}$$

führen auf geschlossenen Pfaden aber zur gleichen Berry-Phase und damit zur gleichen Physik. $\chi(t) = -\varphi(t)\sigma_z$ wäre eine ebenso legitime Wahl in Teilaufgabe e) gewesen und hätte uns zum Hamiltonoperator aus der c) geführt. Die Nichtdiagonalelemente des Hamiltonoperators lauten

$$\tilde{H}_{\text{off-diag}} = \frac{\hbar}{2}(\dot{\varphi}\sin\theta\sigma_x - \dot{\theta}\sigma_y). \tag{30}$$

Wir sehen, dass die adiabatische Näherung nur eine gute Näherung ist, solange $\hbar\dot{\varphi}\sin\theta$ und $\hbar\dot{\theta}$ kleine Beiträge zum Hamiltonian sind im Vergleich zu den Diagonalelementen, andernfalls spielen Übergänge zwischen den instantanen Eigenzuständen eine wichtige Rolle.

2. Klein-Gordon-Gleichung im elektromagnetischen Feld (4 Punkte)

In der Vorlesung haben Sie die Klein-Gordon-Gleichung im elektromagnetischen Feld für ein Teilchen mit Ladung q kennengelernt

$$\left[\left(i\hbar\partial_t - q\phi\right)^2 - c^2\left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\right]\Psi = m^2c^4\Psi \tag{31}$$

mit $A^\mu = (\phi, \boldsymbol{A})$.

a) Zeigen Sie, dass Ψ^* ein Teilchen mit entgegengesetzter Ladung $(-q)$ beschreibt. (1 Punkt)

b) Zeigen Sie, dass der Strom j^μ, der die Kontinuitätsgleichung $\partial_\mu j^\mu = 0$ erfüllt, gegeben ist durch

$$j^\mu = \frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*(\partial^\mu\Psi) - (\partial^\mu\Psi)^*\Psi\right] - \frac{q}{mc}A^\mu\Psi^*\Psi. \tag{32}$$

Drücken Sie diesen Strom mithilfe der kovarianten Ableitung $D_\mu = \partial_\mu + \frac{iq}{\hbar c}A_\mu$ aus. (3 Punkte)

Lösungsvorschlag

a) Die komplex konjugierte Klein-Gordon-Gleichung lautet

$$\left[\big(-i\hbar\partial_t - q\phi\big)^2 - c^2\big(i\hbar\boldsymbol{\nabla} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\big)^2\right]\Psi^* = m^2c^4\Psi^*. \tag{33}$$

Wir können dies wieder in der Form der ursprünglichen Gleichung schreiben, indem wir das Vorzeichen der Ladung umdrehen

$$\left[\big(i\hbar\partial_t - (-q)\phi\big)^2 - c^2\big(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - \frac{(-q)}{c}\boldsymbol{A}\big)^2\right]\Psi^* = m^2c^4\Psi^*. \tag{34}$$

b) Wir drücken die Klein-Gordon-Gleichung zunächst mithilfe der kovarianten Ableitung aus. Es ist

$$\begin{aligned} D_\mu D^\mu &= \left(\partial_\mu + \frac{iq}{\hbar c}A_\mu\right)\left(\partial^\mu + \frac{iq}{\hbar c}A^\mu\right) && (35)\\ &= \left(\frac{1}{c}\partial_t + \frac{iq}{\hbar c}\phi\right)^2 - \sum_{i=1}^{3}\left(\partial_i - \frac{iq}{\hbar c}A_i\right)^2 && (36)\\ &= -\frac{1}{\hbar^2c^2}\left[(i\hbar\partial_t - q\phi)^2 - c^2\left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\right] && (37)\end{aligned}$$

und für die Klein-Gordon-Gleichung folgt damit

$$\left[\hbar^2 D_\mu D^\mu + m^2c^2\right]\Psi = 0. \tag{38}$$

Nun multiplizieren wir diese Gleichung von links mit Ψ^* und ihr komplex konjugiertes mit Ψ. Ziehen wir diese beiden Gleichungen voneinander ab, erhalten wir

$$\begin{aligned} &\Psi^* D_\mu D^\mu\Psi - \Psi(D_\mu D^\mu\Psi)^* = 0 && (39)\\ \Leftrightarrow\quad &\Psi^*\partial_\mu D^\mu\Psi - \Psi\partial_\mu(D^\mu\Psi)^* + \frac{iq}{\hbar c}A^\mu\underbrace{(\Psi^* D_\mu\Psi + \Psi(D_\mu\Psi)^*)}_{=\Psi^*\partial_\mu\Psi + \Psi\partial_\mu\Psi^*} = 0. && (40)\end{aligned}$$

Nun ist außerdem

$$\begin{aligned} \Psi^*\partial_\mu D^\mu\Psi &= \partial_\mu\Psi^* D^\mu\Psi - (\partial_\mu\Psi^*)(D^\mu\Psi) && (41)\\ &= \partial_\mu\Psi^* D^\mu\Psi - (\partial_\mu\Psi^*)(\partial^\mu\Psi) - \frac{iq}{\hbar c}A^\mu\Psi(\partial_\mu\Psi^*), && (42)\\ \Psi\partial_\mu(D^\mu\Psi)^* &= \partial_\mu\Psi(D^\mu\Psi)^* - (\partial_\mu\Psi)(D^\mu\Psi)^* && (43)\\ &= \partial_\mu\Psi(D^\mu\Psi)^* - (\partial_\mu\Psi)(\partial^\mu\Psi^*) + \frac{iq}{\hbar c}A^\mu\Psi^*(\partial_\mu\Psi), && (44)\end{aligned}$$

sodass oben eingesetzt

$$\partial_\mu(\Psi^*(D^\mu\Psi) - \Psi(D^\mu\Psi)^*) = 0 \quad\Leftrightarrow\quad \partial_\mu j^\mu = 0 \tag{45}$$

übrig bleibt. Setzen wir den Ausdruck für die kovariante Ableitung wieder ein, finden wir direkt

$$j^\mu \propto \frac{i}{2}(\Psi^*\partial^\mu\Psi - \Psi\partial^\mu\Psi^*) - \frac{q}{\hbar c}A^\mu\Psi^*\Psi. \tag{46}$$

Der Proportionalitätsfaktor $\hbar/m$ sorgt dann dafür, dass j^μ die korrekten Dimensionen hat $(L^{-2}T^{-1})$.

3. Dirac-Darstellung **(2 Punkte)**

Überzeugen Sie sich davon, dass die 4×4-Matrizen $\boldsymbol{\alpha}$ und β in der Dirac-Darstellung

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \hat{0} & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \hat{0} \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \hat{1} & \hat{0} \\ \hat{0} & -\hat{1} \end{pmatrix}, \tag{47}$$

wobei $\boldsymbol{\sigma}$ die (2×2-)Pauli-Matrizen sind, die folgende Algebra erfüllen

$$\alpha_k^2 = \beta^2 = 1, \quad \{\alpha_k, \alpha_l\} = \{\alpha_k, \beta\} = 0 \quad (\text{für } k \neq l). \tag{48}$$

Lösungsvorschlag

Wir nutzen im Folgenden, dass $\sigma_i^2 = 1$ und $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 0$ wenn $i \neq j$. $\beta^2 = 1$ ist offensichtlich.

$$\alpha_k^2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_k^2 & 0 \\ 0 & \sigma_k^2 \end{pmatrix} = 1, \tag{49}$$

$$\{\alpha_k, \beta\} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{pmatrix} = 0, \tag{50}$$

$$\{\alpha_k, \alpha_l\} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_l \\ \sigma_l & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sigma_l \\ \sigma_l & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \{\sigma_k, \sigma_l\} & 0 \\ 0 & \{\sigma_k, \sigma_l\} \end{pmatrix} \overset{l \neq k}{=} 0. \tag{51}$$