

SEMINAR ZUR THEORIE DER ATOME, KERNE UND KONDENSIERTEN MATERIE

BERRY PHASE - ANWENDUNG UND BEISPIELE

Niklas Olschewski



Inhaltsverzeichnis

1	Spin im Magnetfeld	3
1.1	Theoretische Betrachtung	3
1.2	Experiment	5
2	Aharonov-Bohm-Effekt	7
2.1	Theoretische Betrachtung	7
2.2	Experiment	9
3	Zusammenfassung	11
3.1	Spin im Magnetfeld	11
3.2	Aharonov-Bohm-Effekt	11
3.3	Anwendungsgebiete der Berry Phase	11

1 Spin im Magnetfeld

Als erstes Beispiel für die Auswirkungen der Berry Phase wird ein spinbehaftetes Teilchen betrachtet, welches einem Magnetfeld ausgesetzt ist.

1.1 Theoretische Betrachtung

Im folgenden wird mathematisch die Berry Phase für ein Teilchen mit beliebigen Spin im Magnetfeld hergeleitet. Hierzu bedient man sich des Formalismus der Berrykrümmung \vec{V}^n mit

$$\vec{V}^n = -\text{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n(\vec{R}) | \vec{\nabla}_R \hat{H}(\vec{R}) | m(\vec{R}) \rangle \times \langle m(\vec{R}) | \vec{\nabla}_R \hat{H}(\vec{R}) | n(\vec{R}) \rangle}{(E_m(\vec{R}) - E_n(\vec{R}))^2}. \quad (1)$$

Diese ist über

$$\gamma_n(C) = \int_{S(C)} \vec{V}^n(\vec{R}) d\vec{S}$$

mit der Berry Phase γ_n verknüpft. Zur Bestimmung dieser benötigt man nun also den Hamiltonoperator \hat{H} und die Eigenzustände $|n\rangle$ des Systems.

Für ein Teilchen, welches einen Spin hat und einem Magnetfeld ausgesetzt ist, gilt

$$\hat{H} = \kappa \vec{B} \vec{S}. \quad (2)$$

Hierbei ist \vec{S} der Spinoperator des Teilchens, \vec{B} beschreibt das Magnetfeld, in dem sich das Teilchen befindet und κ ist ein konstanter Faktor, welcher zum Beispiel das gyromagnetische Verhältnis enthält. Für die folgenden Rechnungen wird der Übersichtlichkeit halber $\hbar = 1$ gesetzt. Wie an Gleichung(2) zu erkennen ist, gilt $\hat{H} = \hat{H}(\vec{B})$, womit \vec{B} der langsam variierte Parameter ist. Für die Energien erhält man

$$E_n = \kappa n B \quad (3)$$

und die Eigenzustände sind in der Form $|n, s\rangle$ gegeben. n sind hierbei die $2s + 1$ (von $-s$ bis $+s$) Eigenwerte des Spinoperators \vec{S} . Die Berrykrümmung des Systems ergibt sich nach einsetzen von Gleichung(2) und (3) in (1) zu

$$\begin{aligned} \vec{V}^n &= -\text{Im} \frac{1}{B^2} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n, s | \vec{S} | m, s \rangle \times \langle m, s | \vec{S} | n, s \rangle}{(m - n)^2} \\ &\equiv -\text{Im} \frac{1}{B^2} \sum_{m \neq n} \frac{\vec{S}^{nm} \times \vec{S}^{mn}}{(m - n)^2}. \end{aligned} \quad (4)$$

Hierbei wird das Matrixelement $\langle n, s | \vec{S} | m, s \rangle$ als \vec{S}^{nm} abgekürzt.

Für die weitere Rechnung werden die Achsen des Systems so rotiert, dass die z -Achse in Richtung des \vec{B} -Felds zeigt (freie Achsenwahl). Somit erhält man mit den Auf- und Absteigeoperatoren $S_{\pm} = S_x \pm i S_y$ die Beziehungen:

$$S_z |n, s\rangle = n |n, s\rangle \quad (5)$$

$$S_{\pm} |n, s\rangle = \sqrt{s(s+1) - n(n \pm 1)} |n \pm 1, s\rangle \quad (6)$$

Wegen des Auftretens der Auf- und Absteigeoperatoren, und da $|n\rangle$ eine Orthonormalbasis ist, müssen nur Zustände $m = n \pm 1$ betrachtet werden. Außerdem verschwinden die Komponenten V_x^n und V_y^n , da sie dank

des Kreuzprodukts jeweils den Term $\langle n, s | S_z | m, s \rangle$ enthalten, welcher für $m \neq n$ verschwindet. Drückt man nun die vorkommenden Matrixelemente $S_x^{n\pm 1, n}$ und $S_y^{n\pm 1, n}$ durch die Leiteroperatoren aus, erhält man

$$S_x^{n\pm 1, n} = \frac{1}{2} \sqrt{s(s+1) - n(n\pm 1)}$$

und

$$S_y^{n\pm 1, n} = \mp \frac{1}{2} i \sqrt{s(s+1) - n(n\pm 1)}.$$

Setzt man dies nun in Gleichung(4) für die z -Komponente ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned} V_z^n &= -\text{Im} \frac{1}{B^2} [S_x^{n, n+1} S_y^{n+1, n} - S_y^{n, n+1} S_x^{n+1, n} + S_x^{n, n-1} S_y^{n-1, n} - S_y^{n, n-1} S_x^{n-1, n}] \\ &= \frac{1}{4B^2} [(s(s+1) - n(n+1)) + (s(s+1) - n(n+1)) - (s(s+1) - n(n-1)) - (s(s+1) - n(n-1))] \\ &= -\frac{1}{4B^2} [2n^2 + 2n - 2n^2 + 2n] \\ &= -\frac{n}{B^2}. \end{aligned}$$

Somit folgt für die einzelnen Komponenten der Berrykrümmung

$$V_x^n = V_y^n = 0; V_z^n = \frac{n}{B^2}.$$

Zurückkehren zum allgemeinen Fall ohne rotierte Achsen liefert

$$\vec{V}^n = -\frac{n\vec{B}}{B^3}.$$

Dies entspricht einem Monopolfeld im B -Parameterraum (kein magnetischer Monopol!). Die Berry Phase folgt mit dieser Berrykrümmung zu

$$\begin{aligned} \gamma_n(C) &= -n \int_{S(C)} \frac{\vec{B}}{B^3} d\vec{S} = -n \int_{S(C)} \frac{\vec{B}}{B^3} \vec{e}_B B^2 d\Omega \\ &= -n \int_{S(C)} d\Omega \\ &= -n\Omega(C). \end{aligned}$$

Sie hängt somit nur von dem Öffnungswinkel der Kurve, welche der B -Vektor im Parameterraum beschreibt, zum Ursprung ab. Der geometrische Sachverhalt ist in Abbildung(1) dargestellt.

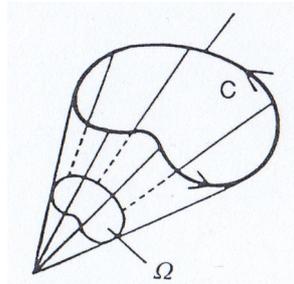


Abbildung 1: Öffnungswinkel einer Kurve im Parameterraum.

[2]

Nun werden die zwei grundsätzlich möglichen Spinkonfigurationen mit diesem Ergebnis eingeordnet:

1) **Fermionen** (Spin halbzahlig)

Für Fermionen nimmt n nur halbzahlige Werte an. Führt der B -Vektor nun eine volle Drehung auf einem Kreis um den Ursprung aus, erhält man einen Raumöffnungswinkel von $\Omega(C) = 2\pi$ und für halbzahlige n ergibt sich der Phasenfaktor zu

$$e^{-in\Omega(C)} = -1.$$

Also ergibt sich nach dieser Drehung eine Phasenverschiebung um 180° .

2) **Bosonen** (Spin ganzzahlig)

Bei Bosonen nimmt n lediglich ganzzahlige Werte an. Für eine Phasenverschiebung um 180° wird folglich eine andere Bewegung des B -Vektors benötigt (eine Kreisbewegung wie bei den Fermionen würde zu einer Phasenverschiebung von 2π führen). Ein Beispiel, welches von Berry selbst in seinem Paper zur Berry Phase gegeben wurde, ist die Bewegung auf einem Kegel mit halben Öffnungswinkel α von 60° . Der Raumwinkel Ω ergibt sich dann zu

$$\Omega = 2\pi \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) = \pi.$$

Somit erhält man wieder eine Phasenverschiebung von 180° .

1.2 Experiment

Für jeden theoretisch postulierten Effekt muss zur physikalischen Anerkennung ein experimenteller Beweis erbracht werden. Berry selbst schlug in seinem Veröffentlichungspaper zur Berry Phase ein Experiment vor: Man könne einen polarisierten monoenergetischen Strahl spinbehafteter Teilchen nehmen und diesen in zwei Teilstrahlen trennen. Für einen Teilstrahl lässt man das \vec{B} -Feld, welches er durchläuft konstant und für den anderen wird die Richtung des \vec{B} -Feldes bei gleichem Betrag entlang einer Kurve C gedreht. Dann werden beide Strahlen wieder rekombiniert und man betrachtet das Interferenzbild abhängig von der Variation des \vec{B} -Feldes.

Solche Experimente wurden in der Tat durchgeführt. Ein Beispiel dafür ist ein Experiment von Bitters und Dubbers, das 1987 publiziert wurde. Bei ihrer Anordnung wird ein vergleichsweise langsamer ($v \approx 500 \frac{m}{s}$), monochromatischer, polarisierter Strahl von Neutronen durch einen Zylinder mit spiralförmigen Magnetfeld geschickt. Die Windung des Magnetfeldes um den Zylinder beträgt 2π . Der Öffnungswinkel des \vec{B} -Feldes im Parameterraum für diese Anordnung hängt direkt von dem Verhältnis der longitudinalen \vec{B} -Feldkomponente B_Z und der transversalen Komponente B_1 ab. Anstelle von den, in Berrys Vorschlag verwendeten zwei Teilstrahlen, wird bei diesem Experiment nur ein Strahl benutzt, allerdings enthält dieser einerseits Neutronen mit Spin up ($S = +1/2$) und andererseits mit Spin down ($S = -1/2$). Somit wird beim Interferenzmuster die Phasendifferenz $\gamma = \gamma_{-1/2} - \gamma_{1/2}$ gemessen. Der Aufbau, sowie die Ergebnisse sind in Abbildung(2) aufgetragen.

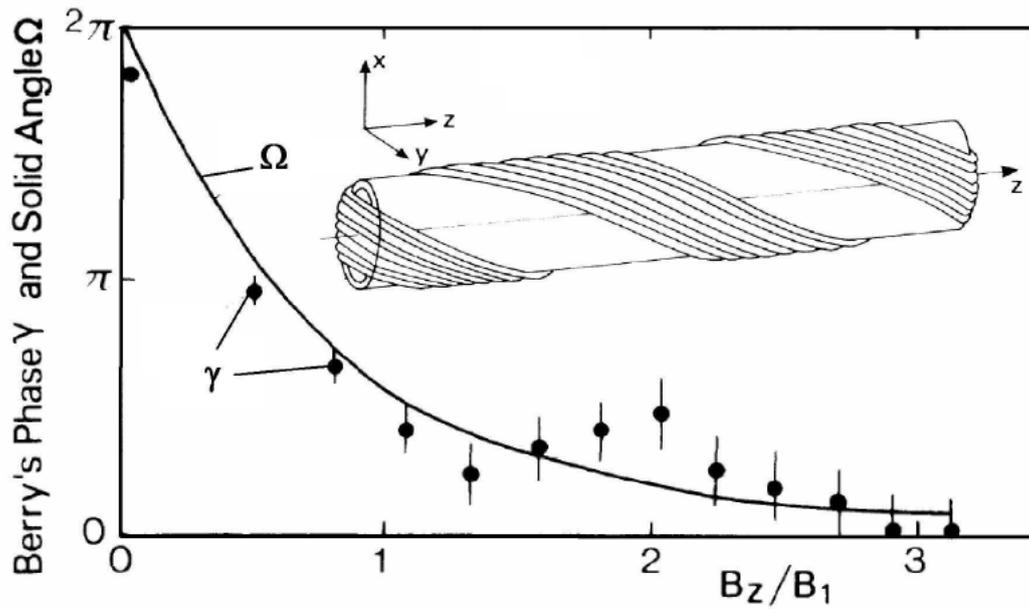


Abbildung 2: Experiment durchgeführt von Bitters und Dubbers zum Nachweis der Berry Phase.

[1]

Die Übereinstimmung der Phasendifferenz beider Strahlen mit dem angegebenen Winkel Ω bestätigt den theoretisch bestimmten Sachverhalt.

2 Aharonov-Bohm-Effekt

Ein weiterer Effekt, im Rahmen dessen man den von Berry entdeckten Formalismus anwenden kann, ist der sogenannte Aharonov-Bohm-Effekt. Bei diesem geht es im Prinzip um die Wirkung, die das mit einem \vec{B} -Feld verbundene Vektorpotential \vec{A} auf ein geladenes Teilchen hat, das sich in einem Bereich aufhält, in dem kein \vec{B} -Feld vorhanden ist.

2.1 Theoretische Betrachtung

Die Anordnung des zugrunde liegenden Gedankenexperiments ist in Abbildung(3) dargestellt.

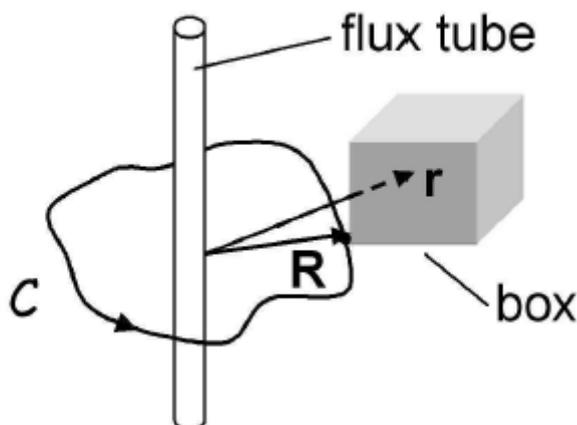


Abbildung 3: Anordnung zum Aharonov-Bohm-Effekt.
[1]

Man stellt sich ein geladenes Teilchen am Ort \vec{r} vor, welches in einer Box, die sich am Ort \vec{R} befindet, lokalisiert ist. Der Ort der Box wird im folgenden der Parameter sein, von dem der Hamiltonoperator des Systems abhängt. Nun bewegt man die Box, also \vec{R} , ausreichend langsam um z.B. einen magnetisch abgedichteten Zylinder, welcher einen magnetischen Fluss Φ enthält. Die Box darf den Zylinder dabei nicht berühren. Aufgrund des vorhandenen Fluss Φ existiert auch außerhalb des Zylinders ein Vektorpotential nach

$$\oint_C \vec{A}(\vec{R}) \cdot d\vec{R} = \Phi.$$

Für das betrachtete Teilchen gilt also, dass es kein \vec{B} -Feld spürt. Der Hamiltonoperator eines freien Systems, also ohne Vektorpotential, ist

$$\hat{H}_0 = \hat{H}(\vec{P}).$$

Hierbei ist \vec{P} der Impulsoperator. Die korrespondierenden Eigenzustände sind von der Gestalt $\psi_n(\vec{r}-\vec{R})$ und die Eigenwerte sind E_n . Wird nun das \vec{B} -Feld im Zylinder angeschaltet, es ergibt sich außerhalb des Zylinders also ein Vektorpotential $\vec{A} \neq 0$, ändert sich der Hamiltonoperator eines Teilchens mit Ladung q zu

$$\hat{H}_0(\vec{P}) \rightarrow \hat{H}(\vec{P} - q\vec{A}).$$

Somit lautet die Eigenwertgleichung zu diesem Hamiltonoperator nun

$$\hat{H}(\vec{P} - q\vec{A})|n(\vec{R})\rangle = E_n|n(\vec{R})\rangle$$

und man sucht die entsprechenden Eigenzustände $|n(\vec{R})\rangle$. Diese sind am Ort \vec{r} gegeben durch die ursprünglichen Eigenzustände $\psi_n(\vec{r} - \vec{R})$ multipliziert mit einem entsprechenden Phasenfaktor (der Dirac-Phasenfaktor), also

$$\langle \vec{r} | n(\vec{R}) \rangle = \exp \left(\frac{iq}{\hbar} \int_{\vec{R}}^{\vec{r}} d\vec{r}' \cdot \vec{A}(\vec{r}') \right) \psi_n(\vec{r} - \vec{R}).$$

Im folgenden wird kurz der Beweis, dass diese Funktion die Schrödingergleichung löst, angeführt (mit $g(\vec{r}) = \frac{q}{\hbar} \int_{\vec{R}}^{\vec{r}} d\vec{r}' \cdot \vec{A}(\vec{r}')$):

$$\begin{aligned} \vec{P}' |n\rangle &= \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r - q\vec{A} \right) e^{ig(\vec{r})} \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) \\ &= e^{ig(\vec{r})} \left(\frac{\hbar}{i} (\vec{\nabla}_r) + \hbar \frac{q}{\hbar} \vec{A}(\vec{r}) - q\vec{A}(\vec{r}) \right) \psi_n \\ &= e^{ig(\vec{r})} \left(\frac{\hbar}{i} (\vec{\nabla}_r \psi_n) \right) \end{aligned}$$

In dieser Rechnung ist \vec{P}' der unter Wirkung des Vektorpotentials veränderte Impulsoperator $\vec{P}' = \vec{P} - q\vec{A}$. Aus obiger Gleichung folgt für zweifaches anwenden von \vec{P}' auf $|n(\vec{R})\rangle$

$$(\vec{P}')^2 |n\rangle = e^{ig(\vec{r})} (-\hbar^2 \Delta_r \psi_n).$$

Einsetzen in die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\frac{(\vec{P}')^2}{2m} |n\rangle = E_n |n\rangle$$

liefert

$$\begin{aligned} e^{ig(\vec{r})} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r \psi_n \right) &= e^{ig(\vec{r})} E_n \psi_n \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r \psi_n &= E_n \psi_n \end{aligned} .$$

Die letzte Gleichung entspricht wieder der Eigenwertgleichung des Hamiltonoperators \hat{H}_0 . Somit lösen die oben angegebenen $|n\rangle$ die Schrödingergleichung des Systems.

Für die Berechnung der Berry Phase wird nun das Berrypotential

$$\vec{A}_{Berry} = -\text{Im} \langle n(\vec{R}) | \vec{\nabla}_R | n(\vec{R}) \rangle$$

benötigt. Mit dem zuvor gefundenen Ausdruck für $|n\rangle$ folgt

$$\begin{aligned} \langle n(\vec{R}) | \vec{\nabla}_R | n(\vec{R}) \rangle &= \int d^3\vec{r} \psi_n^*(\vec{r} - \vec{R}) \left(\frac{-iq}{\hbar} \vec{A}(\vec{R}) \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) + \vec{\nabla}_R \psi_n(\vec{r} - \vec{R}) \right) \\ &= -i \frac{q}{\hbar} \vec{A}(\vec{R}). \end{aligned}$$

Der zweite Term in der Klammer verschwindet, da bei genügend langsamer Änderung von \vec{R} sich der Ort des Teilchens in der Box nicht ändert. Damit ergibt sich für das Berrypotential

$$\vec{A}_{Berry} = \frac{q}{\hbar} \vec{A}(\vec{R}).$$

Es fällt auf, dass das Berrypotential und das Vektorpotential des \vec{B} -Feldes bis auf den Faktor $\frac{q}{\hbar}$ übereinstimmen. Dadurch folgt für die Berry Phase

$$\gamma = \oint_C \vec{A}_{Berry} \cdot d\vec{R} = \frac{q}{\hbar} \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{R} = \frac{q\Phi}{\hbar}.$$

Die Berry Phase γ hängt also nur vom magnetischen Fluss Φ ab und davon, ob die Kurve C , welche \vec{R} durchläuft diesen umschließt.

2.2 Experiment

Ein Nachweis zum oben erläuterten Aharonov-Bohm Effekt wurde z.B. 1987 von Nobuyuki Osakabe und seiner Gruppe erbracht. Hierzu werden ein magnetisch isolierter Ring und zwei Elektronenstrahlen verwendet. Ein Strahl durchquert die Mitte des Rings und der andere passiert diesen außerhalb. Danach wird die Interferenz mit einem für beide Teilstrahlen identischen Referenzstrahl verglichen. Der schematische Aufbau ist in Abbildung(4) dargestellt.

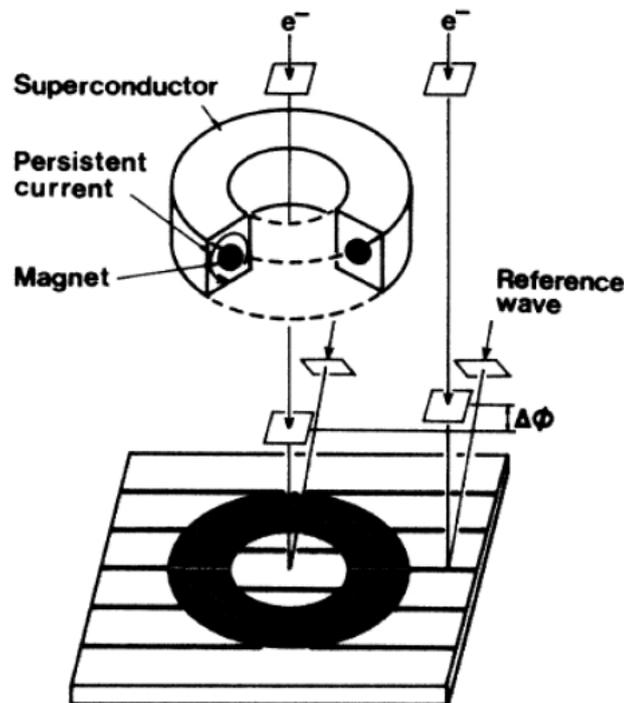


Abbildung 4: Schematischer Versuchsaufbau zum Nachweis des Aharonov-Bohm Effekts nach Osakabe [3]

Der magnetische Fluss Φ , welcher für das Vektorpotential \vec{A} verantwortlich ist, ist nur im magnetischen Kern des Rings vorhanden. Dieser besteht aus Permalloy, einem Nickel-Eisen-Gemisch. Für die magnetische Isolation sorgt ein Supraleiter (im Falle des Osakabe-Experiments aus Niob ($T_c = 9,2 \text{ K}$)). Eine weitere Isolationsschicht aus Kupfer verhindert das Eindringen von Elektronen in den magnetischen Bereich des Rings und eine daraus resultierende Verfälschung des Messergebnisses.

Die komplette magnetische Isolation durch den Supraleiter setzt im Rahmen des Meissner-Ochsenfeld-Effekts ab der kritischen Temperatur T_c ein. Eine weitere Folge dieses Effekts ist die Quantisierung des magnetischen Flusses Φ in Einheiten von $\Phi_0 = \frac{h}{2e}$ (magnetisches Flussquantum), sprich

$$\Phi \rightarrow \Phi_n = n\Phi_0 = n \frac{h}{2e}.$$

Damit folgt für die Berry Phase mit der angegebenen Flussquantisierung und der Ladung von Elektronen ($q = -e$)

$$\gamma = -\frac{e}{\hbar} \Phi = -\frac{e}{\hbar} n \frac{h}{2e} = -n\pi.$$

Somit tritt für gerade n keine Phasenverschiebung (beziehungsweise um $m \cdot 2\pi$, $m \in \mathbb{N}$) und für ungerade n eine Phasenverschiebung um $\pi/2$ auf.

Die Ergebnisse des Experiments sind in Abbildung(5) dargestellt.

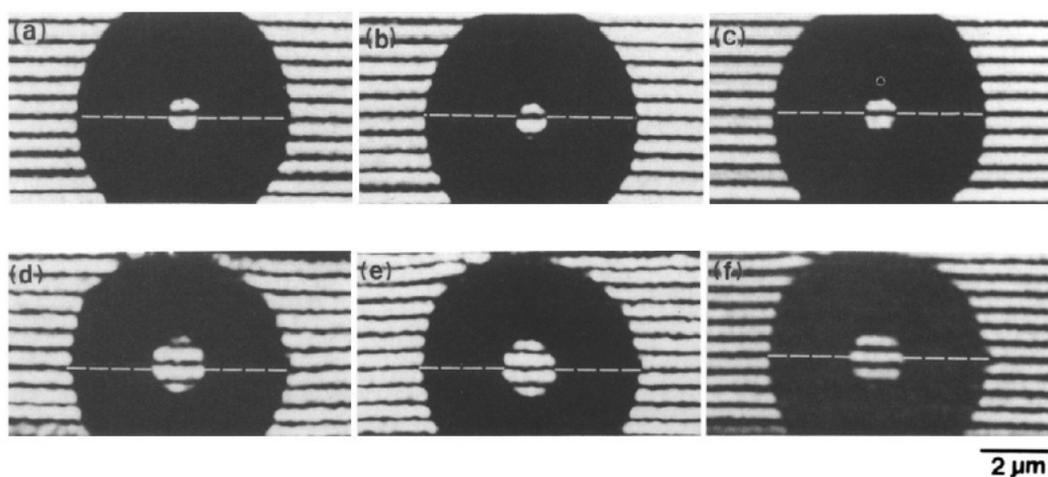


Abbildung 5: Die Ergebnisse des Osakabe-Experiments für verschiedene n , Temperaturen und Phasenmultiplikatoren λ .

[3]

In der ersten Zeile ist n gerade, in der zweiten ungerade. Die Messung zur ersten Spalte wurde bei $T = 15$ K aufgenommen und hat einen Phasenmultiplikator von 2. Die zweite ($\lambda = 2$) und dritte Spalte ($\lambda = 1$) wurden bei $T = 5$ K aufgenommen, also unterhalb der kritischen Temperatur T_c . In der ersten Spalte ($T > T_c$) ist ein Phasenunterschied zwischen äußerem und innerem Strahl zu erkennen. Dieser ist allerdings, wie erwartet, nicht in Einheiten von π gequantelt. In Spalte zwei und drei sind die Folgen des Aharonov-Bohm Effekts und des Meissner-Ochsenfeld-Effekts deutlich zu erkennen. Der Phasenfaktor $\lambda = 2$ sorgt bei den Ergebnissen in Spalte zwei für keine sichtbare Phasendifferenz, was zeigt, dass jede resultierende Phasenverschiebung ein ganzzahliges Vielfaches von π sein muss. In Spalte drei ist dann explizit die Phasenverschiebung um 2π für gerade n und die Phasenverschiebung um π für ungerade n zu erkennen. Dies beweist die Wirkung des Vektorpotentials, hervorgerufen durch den im magnetischen Ring lokalisierten Fluss Φ , auf die Elektronen, welche sich durch die Ringmitte bewegen.

3 Zusammenfassung

3.1 Spin im Magnetfeld

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass ein Teilchen mit Spin, welches einem sich genügend langsam ändernden Magnetfeld ausgesetzt ist eine Berry Phase erhält. Diese Phase ist abhängig von dem Öffnungswinkel, den die Kurve des B -Vektors mit dem Ursprung des \vec{B} -Parameterraum bildet und dem Spineigenwert n des Teilchens. Für Fermionen (Spin halbzahlig) und Bosonen (Spin ganzzahlig) ergeben sich somit für bestimmte Phasenverschiebungen (z. B. um 180°) unterschiedliche Geometrien der Kurve. Ein experimenteller Nachweis dieses Sachverhalts wurde beispielsweise von Bitters und Dubbers mit einem Neutronenstrahl (Neutronen im Zustand Spin up oder Spin down) und einem spiralförmigen Magnetfeld nachgewiesen.

3.2 Aharonov-Bohm-Effekt

Der Aharonov-Bohm-Effekt zeigt, dass das in der klassischen Elektrodynamik als reine "Rechenhilfe" eingeführte Vektorpotential \vec{A} auch physikalische Bedeutung haben kann. Dieser Umstand lässt sich über den von Berry gefundenen Formalismus herleiten und wurde unter anderem 1987 von Osakabe nachgewiesen. In dem Experiment war der magnetische Fluss in einem von Niob (Supraleiter) umgebenen Ring lokalisiert und es wurde ein Elektronenstrahl einerseits durch die Ringmitte als auch am Ring vorbei geführt. Trotz der Isolierung des \vec{B} -Feldes tritt bei dieser Anordnung eine Phasenverschiebung von innerem zu äußerem Strahl auf. Ein weiterer beobachtbarer Effekt bei Temperaturen $T < T_c$ ist die Flussquantisierung $\Phi \rightarrow \Phi_n = n\Phi_0 = n\frac{h}{2e}$.

3.3 Anwendungsgebiete der Berry Phase

Im folgenden werden einige Effekte der Physik genannt, in denen der Formalismus der Berry Phase Anwendung findet:

1. Geschwindigkeit von Elektronen im Festkörper
2. Quanten-Hall Effekt
3. Anomaler Hall-Effekt
4. Elektrische und magnetische Polarisation
5. Topologische Isolatoren

Literatur

- [1] P. Bruno, „Berry phase effects in magnetism“ , Lecture notes published in Magnetism goes nano, Forschungszentrum Julich (2005)
- [2] J.J. Sakurai, „Modern Quantum Mechanics“ , Addison-Wesley, New York (1994)
- [3] N. Osakabe et. al., „Experimental confirmation of Aharonov-Bohm effect using a toroidal magnetic field confined by a superconductor“, Phys. Rev. A 34, 815, (1986)
- [4] M.V. Berry, „Quantal phase factors accompanying adiabatic changes“ , Proc. of the Royal Society of London. Series A, Vol. 392, 45 (1984)
- [5] D. Xiao, M. Chang, Q. Niu, „Berry phase effects on electronic properties“ , Rev. Mod. Phys. 82, 1959 (2010)
- [6] B.A. Bernevig, T. Hughes, „Topological insulators and topological superconductors“ (2013)
- [7] B.R. Holstein, „The adiabatic theorem and Berry’s phase“ , Am. J. Phys. 57, 1079 (1988)
- [8] R. Resta, „Manifestations of Berry’s phase in molecules and condensed matter“ (1999)