Störungstheoretische Betrachtung der instantanen Basis

Betrachte $$\tilde{H}(t) = \overbrace{\Omega H \Omega^{-1}}^{H_0} + \overbrace{i\hbar \dot{\Omega}\Omega^{-1}}^{V}$$

$$= \underbrace{\sum_n |n_0\rangle E_n(\vec{R}(t)) \langle n_0|}_{\text{diagonal in inst. Basis}} + i\hbar \sum_{mn} |m_0\rangle \dot{\vec{R}}(t) \underbrace{\left(\nabla_{\vec{R}} \langle m(\vec{R}(t))|\right) |n(\vec{R}(t))\rangle}_{\neq \delta_{nm} \text{ nicht diagonal}} \langle n_0|$$

Störung ist nicht diagonal !

→ in der adiabatischen Näherung wird jedoch davon ausgegangen, dass keine Übergänge statt finden (Diese ist Voraussetzung für instantane Basis)

→ Voraussetzung für instantane Basis ist, dass $V_{nm} = 0 \quad \forall n \neq m$

→ Betrachte nur Diagonalelemente (wie in ST ! $E_n^{(1)} = V_{nn}$)

Energiekorrektur

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \langle n_0 | V | n_0 \rangle = i\hbar \dot{\vec{R}}(t) \left(\nabla_{\vec{R}} \langle n(\vec{R}(t))| \right) |n(\vec{R}(t))\rangle$$

Zeitabh. SG: $$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = \tilde{H}(t) |\psi(t)\rangle$$

Bekannt ist, dass $\tilde{H}(t)$ in instantaner Basis $\{|n_0\rangle\}$ näherungsweise diagonal ist (unter Verwendung der adiabatischen Näherung)

Somit lässt sich ein Ansatz $|\psi_n(t)\rangle = c(t) |n_0\rangle$ wählen: (nicht zeitabh.)

Einsetzen in SG: $$i\hbar |\dot{\psi}_n(t)\rangle = i\hbar \dot{c}(t) |n_0\rangle = c(t) \tilde{H}(t) |n_0\rangle$$
$$\approx c(t) \left(E_n(\vec{R}(t)) + \varphi_B(t) \right) |n_0\rangle$$

WF außerhalb der instantanen Basis?

$$\Rightarrow \cancel{c(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} (\varphi_0(t') + \varphi_B(t')) dt' \right)}$$

Separation der Variablen für c

$$\Rightarrow c(t) = \exp\Bigg(\underbrace{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \left[E_n(\vec{R}(t')) + i\hbar \dot{\vec{R}}(t') \left(\nabla_{\vec{R}} \langle n(\vec{R}(t'))| \right) |n(\vec{R}(t'))\rangle \right] dt'}_{= i\varphi(t)} \Bigg)$$

mit $\varphi_D(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^{t} E_n(\vec{R}(t')) dt'$ – „dynamische Phase"

und $$\varphi_B(t) = -i \int_{t_0}^{t} \left(\nabla_{\vec{R}} \langle n(\vec{R}(t'))| \right) |n(\vec{R}(t'))\rangle \underbrace{\dot{\vec{R}}(t') dt'}_{= d\vec{R}}$$ – „Berry-Phase", bzw. „geometrische Phase" (da Integral über den „Ort" im Parameterraum $\{\vec{R}\}$)

$$= -i \int_{\vec{R}(t_0)}^{\vec{R}(t)} \left(\nabla_{\vec{R}} \langle n(\vec{R}')| \right) |n(\vec{R}')\rangle d\vec{R}'$$

Frage: ist φ_B komplex? → dann würde $c(t)$ die Amplitude der WF ändern!

$$\nabla_{\vec{R}} \underbrace{\langle n(\vec{R}) | n(\vec{R}) \rangle}_{=1} = 0$$
$$= \left(\nabla_{\vec{R}} \langle n(\vec{R})| \right) |n(\vec{R})\rangle + \underbrace{\langle n(\vec{R})| \left(\nabla_{\vec{R}} |n(\vec{R})\rangle \right)}_{= \left[\left(\nabla_{\vec{R}} \langle n(\vec{R})| \right) |n(\vec{R})\rangle \right]^*}$$
$$= 2\,\mathrm{Re} \left\{ \left(\nabla_{\vec{R}} \langle n(\vec{R})| \right) |n(\vec{R})\rangle \right\}$$

$\Rightarrow \left(\nabla_{\vec{R}} \langle n(\vec{R})| \right) |n(\vec{R})\rangle \in i\mathbb{R}$ ist rein ~~komplex~~ imaginär !

⇒ Berry-Phase ist reell

⇒ $c(t)$ ist ein reiner Phasenterm ($|c(t)| = 1$) und somit nur für Überlagerungszustände relevant

↳ $|\psi\rangle = \sum_n a_n(t) |\psi_n(t)\rangle$, dann Berryphase relevant

Siehe auch → Korrektur mittels ST berechnen
→ Adiabatische Näherung
→ Instantane Basis
→ Eichabh. Berryphase