

# Berry-Phase und Spinstreuung

## Bachelorarbeit

zur Erlangung des Grades eines Bachelor of Science in Physik  
an der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der Universität zu Köln



vorgelegt von

Mascha Fiona Baedorf

Geboren am 06.08.1988 in Bergisch-Gladbach

Erstprüfer: Prof. Dr. Achim Rosch

Köln im Oktober 2011







# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1	Adiabatensatz . . . . .	5
2.2	Berry-Phase . . . . .	7
2.2.1	Phasenverschiebung entlang nicht geschlossener Kurven . . . . .	7
2.2.2	Phasenverschiebung entlang geschlossener Kurven . . . . .	8
2.2.3	Interpretation der Berry-Phase . . . . .	10
2.2.4	Krümmung von Kurven . . . . .	10
2.2.5	Nachweis der Berry-Phase . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Teilchen im Magnetfeld</b>	<b>13</b>
3.1	Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen . . . . .	13
3.1.1	Lösung des Hamiltonoperators . . . . .	13
3.1.2	Bestimmung der Berry-Phase . . . . .	14
3.1.3	Vergleich mit der vom Weg eingeschlossenen Fläche . . . . .	15
3.2	Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen mit Masse $m$ . . . . .	16
3.2.1	Lösung des Impulsoperators . . . . .	18
3.2.2	Lösung des Hamiltonoperators . . . . .	19
3.2.3	Das System bei fester Energie $E$ . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Näherungslösung</b>	<b>23</b>
4.1	Genäherte Energieniveaus . . . . .	23
4.2	Adiabatischer Ansatz . . . . .	23
<b>5</b>	<b>Deltapotenzialstörung</b>	<b>27</b>
5.1	Anschlussbedingungen . . . . .	27
5.2	Streuung eines reinen Zustands . . . . .	28
5.3	Berechnung der Spinfliprate . . . . .	29
5.3.1	Näherung für $\nabla\varphi \rightarrow 0$ . . . . .	30
5.3.2	Näherung für $1 \ll \alpha \ll \sqrt{E}$ . . . . .	33
5.3.3	Übergang der Näherungen . . . . .	35
5.3.4	Reskalierung der Ergebnisse . . . . .	35
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick</b>	<b>39</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>43</b>
	<b>Eigenständigkeitserklärung</b>	<b>45</b>



# Abbildungsverzeichnis

1.1	Skyrmionengitter . . . . .	1
1.2	Magnetisches Phasendiagramm von MnSi . . . . .	2
1.3	Topologische Äquivalenz eines Skyrmionengitter zu einem magnetischen Monopolfeld . . . . .	3
2.1	Zeitliche Entwicklung von Energieniveaus . . . . .	6
2.2	Vektorfluss durch eine Fläche . . . . .	10
3.1	Elektron im Magnetfeld . . . . .	16
3.2	$E_{\uparrow}$ gegen $\theta$ . . . . .	20
3.3	$E_{\downarrow}$ gegen $\theta$ . . . . .	20
3.4	$E$ gegen $\theta$ . . . . .	20
5.1	$E$ gegen $n$ . . . . .	31
5.2	$\Gamma_{SF}$ gegen $\theta$ . . . . .	31
5.3	$\Gamma_{SF}$ gegen $\alpha$ . . . . .	31
5.4	$\Gamma_{SF}$ gegen $E$ . . . . .	32
5.5	$\Gamma_{SF}$ gegen $E$ . . . . .	32
5.6	$\log(\Gamma_{SF})$ gegen $\log(E)$ . . . . .	32
5.7	$\Gamma_{SF}^1 \cdot \alpha^2$ gegen $\alpha$ . . . . .	34
5.8	$\Gamma_{SF}$ und $\Gamma_{SF}^1$ gegen $\alpha$ . . . . .	34
5.9	$\Gamma_{SF}$ und $\Gamma_{SF}^1$ gegen $\alpha$ . . . . .	34
5.10	$\Gamma_{SF}$ und $\Gamma_{SF}^2$ gegen $\alpha$ . . . . .	36
5.11	$\Gamma_{SF}$ , $\Gamma_{SF}^1$ und $\Gamma_{SF}^2$ gegen $\alpha$ . . . . .	36
5.12	$\log(\Gamma_{SF})$ , $\log(\Gamma_{SF}^1)$ und $\log(\Gamma_{SF}^2)$ gegen $\alpha$ . . . . .	36



# 1 Einleitung

Alle Oberflächen von Festkörpern zeigen keine Inversionssymmetrie, während 65 der 230 Raumgruppen sogar chiral sind. Chiral bedeutet, dass sich das Spiegelbild eines solchen Festkörpers nicht durch einfache Drehungen und Translationen auf sein Original abbilden lässt. Durch diese Eigenschaften kann die Spin-Bahnkopplung zu antisymmetrischen Komponenten der magnetischen Wechselwirkung führen.

Befindet sich ein Festkörper bei einer Temperatur  $T$  in einem äußeren Magnetfeld  $B$ , so liegt die magnetische Phase vor, die die freie Energie minimiert.

Für Temperaturen in der Nähe der Phasenübergangstemperatur  $T_c$  lässt sich das Ginzburg-Landau-Energiefunktional  $F[M]$  mit der Magnetisierung  $M$  schreiben als

$$F[M] = \int d^3r [r_0 M^2 + J(\nabla M)^2 + 2DM \cdot (\nabla \times M) + UM^4 - B \cdot M], \quad (1.0.1)$$

wobei alle Terme außer des zweiten und dritten aus der Taylorentwicklung der freien Energie nach der Magnetisierung für inversionssymmetrische Kristalle stammen. In der Nähe des Phasenübergangs ist die Magnetisierung klein, sodass Terme höherer Ordnung vernachlässigt werden dürfen. Der zweite Term ergibt sich aus der Gradientenentwicklung. Liegt jedoch keine Inversionssymmetrie vor, so tritt zusätzlich der dritte Term auf: Der sogenannte Dzyaloshinsky-Moriya Wechselwirkungsterm, der eine Verkippung der magnetischen Momente bewirkt, während die symmetrischen Wechselwirkungsterme hier eine parallele Ausrichtung der magnetischen Momente energetisch begünstigen. Die Kombination von diesen Wechselwirkungen bewirkt, dass bei bestimmten Temperaturen in der Nähe von  $T_c$  und einem äußeren Magnetfeld  $B$  eine magnetische Ordnung erzeugt wird, die man als Skyrmionengitter (A-Phase) bezeichnet. Das Skyrmionengitter bildet sich unabhängig von der Orientierung des Kristalls immer parallel zum äußeren Magnetfeld aus. Skyrmionen sind nach dem britischen Physiker Tony Skyrme benannt.

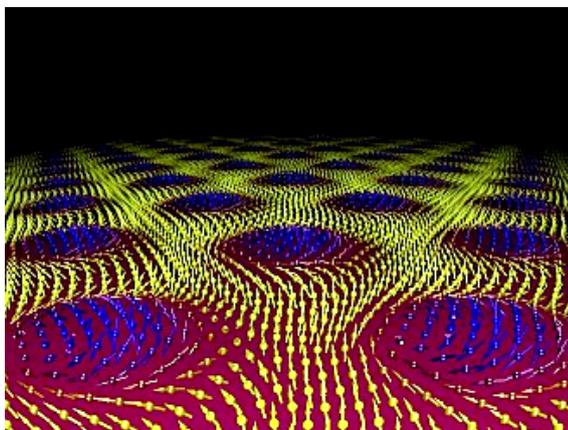


Abbildung 1.1: Skyrmionengitter

Als spezielles Beispiel für einen Festkörper mit obigen Eigenschaften wird Mangansilizium ( $\text{MnSi}$ ) betrachtet.

Je nach Temperatur und äußerem Magnetfeld zeigt MnSi verschiedene magnetische Ordnungen. Ohne äußeres Magnetfeld liegt bei  $T_c = 29,5K$  ein Übergang von einem Para- zu einem Helimagneten vor, in dem die magnetischen Momente wendeltreppenartig ähnlich wie bei der DNS angeordnet sind.

In der konischen Phase sind die magnetischen Momente wendeltreppenartig mit Kippung in die entsprechende Richtung des Magnetfeldes angeordnet.

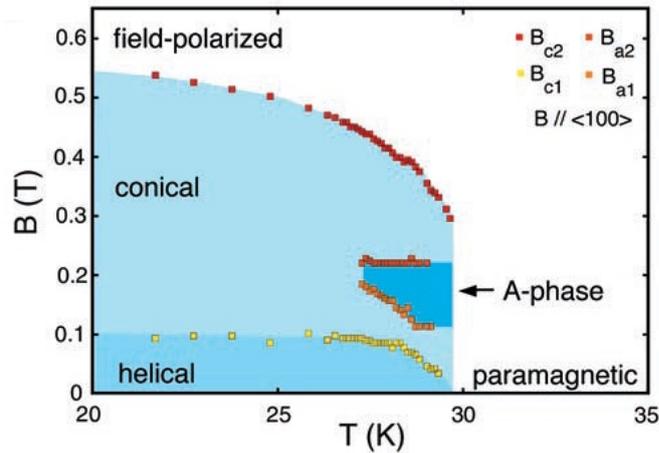


Abbildung 1.2: Magnetisches Phasendiagramm von MnSi

Bereits 1989 hat der ukrainische Physiker Alexey Bogdanov eine neue magnetische Ordnung vorhergesagt, die aus einem Gitter von Spinwirbeln besteht, für jedoch anisotrope chirale Magnete.

Heute lässt sich die Existenz von Skyrmionen z.B. mit Neutronenstreuung zeigen.[1]

Bewegt sich ein Elektron durch ein Skyrmionengitter, so präzediert sein Spin langsam um die sich langsam ändernde Richtung des Magnetfeldes. Bleibt sein Spin erhalten, so erhält die Wellenfunktion eine zusätzliche Phase: Die Berry-Phase.

Die Berry-Phase wurde 1984 von dem britischen Physiker Michael Berry entdeckt.

In einem konventionellen Magnetfeld verschwindet die Windungszahl pro Einheitszelle und damit auch die Berry-Phase.

Fließt ein Strom durch das Skyrmionen-Gitter, wechselwirkt er ab  $\sim 10^6 Am^{-2}$  mit den ausgerichteten Spins des Gitters. Dadurch wird das Gitter lokal etwas verschoben und verdreht<sup>1</sup>, d.h. man kann die Spinausrichtung mittels Strömen manipulieren, was unter dem Begriff "spin-torque" bekannt ist.[2][3]

In dieser Bachelorarbeit wird ein Elektron betrachtet, das sich in der xy-Ebene auf einer Kreisbahn mit Radius R durch ein Magnetfeld bewegt, das adiabatisch verändert wird.

Zunächst wird die Berry-Phase eines negativen Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchens in einem adiabatisch ändernden Magnetfeld bestimmt und mit der eingeschlossenen Fläche im Parameterraum verglichen. Anschließend betrachtet man das Teilchen mit Masse m, das sich auf einer Kreisbahn mit Radius R im Magnetfeld bewegt und bestimmt die Eigenenergien des Systems. Mit den

<sup>1</sup>Siehe hierzu <http://www.ph.tum.de/aktuelles/2010/036>

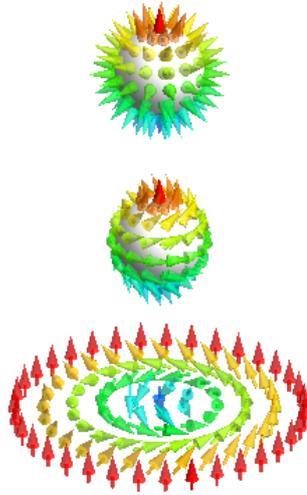


Abbildung 1.3: Topologische Äquivalenz eines Skyrmionengitter zu einem magnetischen Monopolfeld

daraus resultierenden Ergebnissen wird gezeigt, dass sich das System adiabatisch verhält, wenn man das System Teilchen-Magnetfeld groß genug wählt. Als großes System bezeichnet man hier ein System, bei dem der Parameter  $\alpha \propto B_0 m R^2$  groß ist. Schließlich wird noch die Streuung des bewegten Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen auf der Kreisbahn an einem Deltapotenzial untersucht, was einer Störstelle im Kristall entspricht. Das Teilchen wird mit Anfangsspin parallel zum Magnetfeld an dem Deltapotenzial gestreut und die Spinfliprate, also die Wahrscheinlichkeit berechnet, mit der der Spin nach der Streuung antiparallel zum B-Feld ausgerichtet ist. Für bestimmte Bereiche der Spinfliprate werden Näherungslösungen gesucht, die die Spinfliprate asymptotisch beschreiben.



## 2 Grundlagen

Die folgenden Abschnitte dieses Kapitels können genauer in [4],[5] und [6] nachgelesen werden.

### 2.1 Adiabatensatz

Gegeben ist der Hamiltonoperator  $H(R)$  eines Systems, dessen Systemparameter  $R=R(t)$  stetig-differenzierbar von der Zeit  $t$  abhängen. Gleichzeitig seien die Eigenzustände nicht entartet sein.

Wegen der Zeitabhängigkeit der Hamiltonoperatoren hängen sowohl die Projektionen  $a_m$  auf die Eigenzustände  $|\psi_m\rangle$  als auch die Eigenzustände von der Zeit ab. Man macht deswegen folgenden Ansatz für die Zeitentwicklung des Systems

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m a_m(t) |\psi_m(t)\rangle. \quad (2.1.1)$$

Der zugehörige Eigenwert zum Eigenzustand  $|\psi_m(t)\rangle$  wird mit  $E_m(t)$  bezeichnet, damit gilt

$$H|\psi_m\rangle = E_m|\psi_m\rangle.$$

Da  $H$  hermitesch ist, können die Eigenzustände  $|\psi_m\rangle$  so gewählt werden, dass

$$\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}. \quad (2.1.2)$$

Die Eigenzustände bilden also eine Orthonormalbasis. Den obigen Ansatz (2.1.1) für die Zeitentwicklung des Systems setzt man in die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

ein.

Die Projektion auf den Zustand  $\langle\psi_m|$  ergibt wegen (2.1.2)

$$\frac{\partial}{\partial t} a_m(t) + \sum_n \langle\psi_m|\nabla_R|\psi_n\rangle \frac{\partial R}{\partial t} a_n(t) = -\frac{i}{\hbar} E_m(t) a_m(t).$$

Es werden adiabatische Zustände betrachtet, d.h. befindet sich das System zur Zeit  $t_0$  im Eigenzustand  $|\psi_m(t_0)\rangle$ , so soll es sich zur Zeit  $t$  im Zustand  $|\psi_m(t)\rangle$  befinden. Es findet demnach kein Übergang in einen anderen Zustand statt, sondern das System entwickelt sich zeitlich entlang des sich zeitlich ändernden Eigenzustands  $|\psi_m(t)\rangle$ .

Da der Systemparameter  $R$  im Verhältnis zu den Eigenfrequenzen sehr langsam verändert wird, werden die nichtadiabatischen Übergangselemente als vernachlässigbare Störung betrachtet

$$\left| \langle\psi_m|\nabla_R|\psi_n\rangle \frac{\partial R}{\partial t} a_n(t) \right| \ll |a_m(t)| \text{ für } n \neq m.$$

Es ergibt sich folgende Differenzialgleichung für die Projektionskoeffizienten  $a_m(t)$

$$\frac{\partial}{\partial t} a_m(t) = -\langle\psi_m|\nabla_R|\psi_m\rangle \frac{\partial R}{\partial t} a_m(t) - \frac{i}{\hbar} E_m(t) a_m(t). \quad (2.1.3)$$

Trennung der Variablen und anschließende Integration führt zu

$$a_m(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t E_m(t') dt'\right) \exp(i\gamma_m(t)) a_m(t_0)$$

mit

$$\begin{aligned} \gamma_m(t) &= i \int_{t_0}^t \langle \psi_m | \nabla_R | \psi_m \rangle \frac{\partial R}{\partial t} dt' \\ &= i \int_C \langle \psi_m | \nabla_R | \psi_m \rangle dR. \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

wobei  $C$  der Weg im Parameterraum.

Befindet sich ein System zur Zeit  $t_0$  im Eigenzustand  $|\psi_m(t_0)\rangle$ , dann gilt für die Zeitentwicklung

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t E_m(t) dt'\right) \exp(i\gamma_m(t)) |\psi_m(t)\rangle.$$

Die Eigenzustände von  $H(t_0)$  entwickeln sich also abgesehen von einer Phase entlang der adiabatischen Eigenzustände von  $H(t)$ .

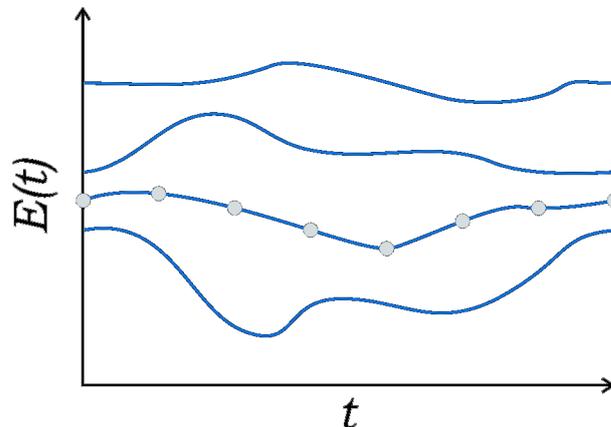


Abbildung 2.1: Befindet sich ein System zur Zeit  $t=0$  in einem bestimmten Energiezustand und ändert man die Systemparameter adiabatisch, so bleibt das System in dem sich zeitlich ändernden Energiezustand. [7]

Nach Annahme ist der Hamiltonoperator nicht entartet, sodass sich die Energieniveaus nicht schneiden.

Die zeitliche Entwicklung eines beliebigen Anfangszustands

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_m a_m(t_0) |\psi_m(t_0)\rangle$$

ist dann gegeben durch

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m a_m(t_0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t E_m(t) dt'\right) \exp(i\gamma_m(t)) |\psi_m(t)\rangle.$$

Für die zeitliche Entwicklung von Zuständen bei infinitesimaler Änderung der Systemparameter  $R$  ist es demnach ausreichend, die von der Zeit abhängenden Eigenenergien und Eigenzustände des von der Zeit abhängenden Hamiltonoperators zu berechnen. [4] [5]

## 2.2 Berry-Phase

Man betrachtet ein System beschrieben durch den Parametervektor  $R$ , das sich adiabatisch entlang eines Weges  $C$  im Phasenraum bewegt. Vergleicht man die Phase des System am Anfangs- und Endpunkt des Weges, so stellt man eine Phasendifferenz fest. Diese setzt sich aus zwei Teilen zusammen. Zum einen der dynamischen Phase

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t E_m(t') dt'\right),$$

die man auch von zeitunabhängigen Hamiltonoperatoren kennt und einer geometrischen Phase, die durch (2.1.4)

$$i \int_C \langle \psi_m | \nabla_R | \psi_m \rangle dR \quad (2.2.1)$$

bestimmt ist. Diese hängt nicht von der Zeit ab, die benötigt wird um den Weg zurückzulegen, sondern nur von der Geometrie des Weges. Man bezeichnet sie als Berry-Phase  $\gamma_m$  zum Zustand  $|\psi_m(t)\rangle$ .

Die Berry-Phase ist reell, da  $\langle \psi_m | \nabla_R | \psi_m \rangle$  imaginär ist, denn die Normierbarkeit von  $|\psi_m\rangle$  impliziert

$$\langle \psi_m | \psi_m \rangle = 1$$

und Ableiten ergibt

$$\begin{aligned} \langle \nabla_R \psi_m | \psi_m \rangle + \langle \psi_m | \nabla_R | \psi_m \rangle &= 0 \\ \Rightarrow \langle \nabla_R \psi_m | \psi_m \rangle + \langle \nabla_R \psi_m | \psi_m \rangle^* &= 0. \end{aligned}$$

Die folgenden drei Abschnitte sind inhaltlich sehr nah an [4] gehalten.

### 2.2.1 Phasenverschiebung entlang nicht geschlossener Kurven

In diesem Abschnitt werden Kurven  $C$  im Parameterraum betrachtet, die nicht geschlossen sind, was äquivalent ist zu

$$R(t_1) = R(t_2) \quad \Rightarrow \quad t_1 = t_2.$$

Führt man eine vektorwertige Funktion  $A_m$  ein, so lässt sich die Phasenverschiebung schreiben als

$$\gamma_m(t) = \int_{t_0}^t A_m dR,$$

wobei  $A_m = i\langle\psi_m|\nabla_R|\psi_m\rangle$ .  $A_m$  bezeichnet man auch als Mead-Berry-Vektorpotenzial. Ziel ist es zunächst die Phasenverschiebung reiner Zustände durch geeignete Eichtransformationen verschwinden zu lassen.

Betrachtet man eine Transformation der Form

$$|\psi_m(t)\rangle \longrightarrow |\psi'_m(t)\rangle = \exp(i\zeta_m(t))|\psi_m(t)\rangle,$$

dann gilt für das zugehörige Mead-Berry-Vektorpotenzial

$$\begin{aligned} A_m(t) &\longrightarrow A'_m(t) = i\langle\psi'_m|\nabla_R|\psi'_m\rangle \\ &= i\langle\psi_m \exp(i\zeta_m)|\nabla_R|\psi_m \exp(i\zeta_m)\rangle \\ &= i\langle\psi_m|\nabla_R|\psi_m\rangle + i\exp(-i\zeta_m)\nabla_R\exp(i\zeta_m) \\ &= A_m(t) - \nabla_R\zeta_m(t). \end{aligned}$$

Die transformierte Phasenverschiebung  $\gamma'_m$  ist demnach gegeben durch

$$\begin{aligned} \gamma_m &\longrightarrow \gamma'_m = \int_{R(t_0)}^{R(t)} A'_m dR \\ &= \gamma_m(t) - \zeta_m(t) + \zeta_m(t_0). \end{aligned} \tag{2.2.2}$$

$\zeta_m(t)$  kann so gewählt werden, dass  $\zeta_m(t_0) = 0$ .

Berechnet man  $|\psi(t)\rangle$  mit den gestrichenen Größen anstelle von  $|\psi_m\rangle$ , ergibt sich

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t E_m(t')dt'\right) \exp(i\gamma'_m(t))|\psi'_m(t)\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t E_m(t')dt'\right) \exp(i\gamma'(t)) \exp(i\zeta_m(t))|\psi_m(t)\rangle. \end{aligned}$$

$\zeta_m(t)$  lässt sich so wählen, dass  $\gamma'_m(t) + \zeta_m(t) = 2\pi n$

$$= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t E_m(t')dt'\right) |\psi_m(t)\rangle.$$

Die Berry-Phase lässt sich folglich durch geeignete Wahl der Eichtransformation lokal wegehen. Da die Transformation aber nicht global ist, erkennt man den geometrischen Charakter der Berry-Phase.

Für nicht geschlossene Wege hat die Berry-Phase lokal keine Bedeutung.[5][6][8]

### 2.2.2 Phasenverschiebung entlang geschlossener Kurven

In diesem Abschnitt werden Kurven betrachtet, die geschlossen sind. Das bedeutet nach einer Zeit  $T$  gilt

$$R(t_0) = R(t_0 + T).$$

Damit gilt dann auch (single valuedness)

$$\begin{aligned} H(t_0) &= H(t_0 + T), \\ E_m(t_0) &= E_m(t_0 + T), \\ \text{und } |\psi_m(t_0)\rangle\langle\psi_m(t_0)| &= |\psi_m(t_0 + T)\rangle\langle\psi_m(t_0 + T)|. \end{aligned}$$

Demnach muss auch gelten

$$\begin{aligned} \exp(i\zeta_m(t_0)) &= \exp(i\zeta_m(t_0 + T)) \\ \Rightarrow \zeta_m(t_0) &= \zeta_m(t_0 + T) + 2\pi n \quad n \in \mathbb{Z}. \end{aligned}$$

d.h.  $\zeta_m(T)$  kann nicht mehr frei gewählt werden, um  $\gamma_m(T)$  wegzueichen. Mit (2.2.2) folgt für die eichtransformierte Berry-Phase

$$\begin{aligned} \gamma'_m(T) &= \oint_C A'_m dR \\ &= \gamma_m(T) + 2\pi n. \end{aligned}$$

Man erkennt also, dass sich die Berry-Phase bei geschlossenen Kurven nicht wegeichen lässt (Eichinvarianz von  $\gamma_m$ ). Hier darf die Berry-Phase demnach nicht vernachlässigt werden, sondern muss in ihrem Einfluss auf das Verhalten des quantenmechanischen Systems berücksichtigt werden.

Der Winkel  $\gamma_m(T)$  wird Berry-Phasenwinkel genannt.

Unter der Annahme, dass  $R \in \mathbb{R}$  ist, lässt sich das Linienintegral mit dem Stoke'schen Satz in ein Flächenintegral umschreiben

$$\begin{aligned} \gamma_m &= i \int_C \langle \psi_m | \nabla_R | \psi_m \rangle dR \\ &= i \int_A \nabla_R \times \langle \psi_m | \nabla_R | \psi_m \rangle d\vec{a} \\ &= i \int_A \langle \nabla_R \psi_m | \times | \nabla_R \psi_m \rangle d\vec{a}, \end{aligned}$$

wobei A die von C im Parameterraum eingeschlossene Fläche ist.

Ergänzt man einen Einheitsoperator, ergibt sich

$$\gamma_m = i \sum_{n \neq m} \int_A \langle \psi_m | \nabla_R | \psi_n \rangle \times \langle \psi_n | \nabla_R | \psi_m \rangle d\vec{a}. \quad (2.2.3)$$

Das Kreuzprodukt im Integranden lässt sich umschreiben, indem man die Schrödingergleichung für die Eigenfunktion  $|\psi_m\rangle$  betrachtet

$$\begin{aligned} H|\psi_m\rangle &= E_m|\psi_m\rangle \\ \Rightarrow (\nabla_R H)|\psi_m\rangle + H\nabla_R|\psi_m\rangle &= (\nabla_R E_m)|\psi_m\rangle + E_m\nabla_R|\psi_m\rangle. \end{aligned}$$

Linksmultiplikation mit  $\langle \psi_n |$  liefert für  $n \neq m$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle \psi_n | \nabla_R H | \psi_m \rangle + E_n \langle \psi_n | \nabla_R | \psi_m \rangle &= E_m \langle \psi_n | \nabla_R | \psi_m \rangle \\ \Rightarrow \langle \psi_n | \nabla_R | \psi_m \rangle &= \frac{\langle \psi_n | \nabla_R H | \psi_m \rangle}{E_m - E_n}. \end{aligned}$$

Einsetzen in (2.2.3) ergibt schließlich für die Berry-Phase

$$\gamma_m = \int_A i \sum_{n \neq m} \frac{\langle \psi_m | \nabla_R H | \psi_n \rangle \times \langle \psi_n | \nabla_R H | \psi_m \rangle}{(E_m - E_n)^2} d\vec{a}. \quad (2.2.4)$$

[12]

### 2.2.3 Interpretation der Berry-Phase

Gegeben sei ein Vektorfeld  $\vec{V}_m$ . Der Fluss  $\Phi_m$  des Vektorfeldes  $\vec{V}_m$  durch eine Fläche  $A$  ist gegeben durch

$$\Phi_m = \int_A \vec{V}_m \cdot d\vec{a}.$$

Definiert man in (2.2.4)

$$\vec{V}_m = i \sum_{n \neq m} \frac{\langle \psi_m | \nabla_R H | \psi_n \rangle \times \langle \psi_n | \nabla_R H | \psi_m \rangle}{(E_m - E_n)^2},$$

so lässt sich die Berry-Phase als ein Fluss von  $\vec{V}_m$  durch die vom Weg  $C$  eingeschlossene Fläche  $A$  interpretieren (siehe Abbildung (2.2)).[9]

Die Berry-Phase kann also auch verschwinden und zwar genau dann, wenn der Fluss  $\Phi_m$  durch  $A$  ein Vielfaches von  $2\pi$  beträgt, denn dann gilt

$$\exp(i\gamma_m) = 1,$$

d.h. der Phasenfaktor verschwindet. [6]

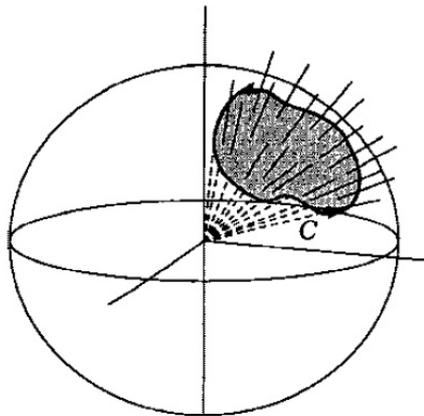


Abbildung 2.2: Vektorfluss eines Monopolfeldes durch die von  $C$  eingeschlossene Fläche auf der  $S^2$ -Sphäre.[9]

### 2.2.4 Krümmung von Kurven

Die Krümmung ist ein Maß für die Richtungsänderung der Kurve auf einem infinitesimal kleinen Bogenstück. Bei einer Ebene verschwindet die Krümmung in jedem Punkt. Allgemein gilt für die Krümmung  $\kappa$  einer Kurve

$$\kappa = \left\| \frac{d^2 \vec{r}}{ds^2} \right\|$$

mit  $\vec{r}$  einem Punkt auf der Kurve und  $s$  der Bogenlänge.  
Für eine Kugel mit Radius  $R$  gilt beispielsweise, wenn man  $\theta$  festhält.

$$\vec{r} = R \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad s = R\varphi \cos \theta$$

und damit

$$\kappa = \frac{1}{R^2}.$$

Diese Betrachtung genügt auf Grund der Symmetrie der Kugel.

Die Totalkrümmung einer geschlossenen Kurve  $C$  mit  $c(t_0) = c(t_0 + T)$  ist gegeben durch

$$\int_C \kappa(s) ds = \int_{t_0}^{t_0+T} \kappa(t') \|\dot{c}(t')\| dt',$$

Damit entspricht die Totalkrümmung einer Kugel genau dem von dem Weg  $C$  ausgespannten Raumwinkel. [5][8][10]

### 2.2.5 Nachweis der Berry-Phase

Eine Möglichkeit die Berry-Phase nachzuweisen, liegt darin ein Interferometer zu benutzen. Dabei wird ein Messstrahl in zwei Teilstrahle aufgespalten. Der eine wird z.B. einem magnetischen Fluss ausgesetzt und anschließend mit dem anderen zur Interferenz gebracht. In Abhängigkeit der zusätzlichen Phase, die der eine Strahl erhält, ergibt sich ein entsprechendes Interferenzbild. [5]



## 3 Teilchen im Magnetfeld

Zur Vereinfachung der Notation wird im Folgenden bei der Notation die Einheitsmatrix  $I$  weggelassen, sodass  $\frac{\partial}{\partial \varphi} = I \frac{\partial}{\partial \varphi}$ .

Gegeben sei ein Magnetfeld  $\vec{B}_0(\vec{r})$  mit

$$\vec{B}_0(\vec{r}) = B_0 \hat{n}(\varphi, \theta) = B_0 (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)^T. \quad (3.0.1)$$

Ein solches Feld beschreibt das Magnetfeld eines magnetischen Monopols im Ursprung des Koordinatensystems.

### 3.1 Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen

Betrachtet wird die Wechselwirkung eines negativ geladenen Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchens mit dem Magnetfeld  $\vec{B}_0(\varphi(t))$  (3.0.1), dessen Parameter  $\varphi$  adiabatisch variiert wird. Dadurch verändert sich die Richtung des Magnetfeldes adiabatisch.

Ziel dieses Unterkapitels ist es, die Berry-Phase zu bestimmen, die das Teilchen erhält, wenn das Magnetfeld adiabatisch um eine Periode variiert wird und zu zeigen, dass diese mit der Hälfte der Fläche, die im Parameterraum eingeschlossen wird, übereinstimmt.

Der Hamiltonoperator eines negativen Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchens ist gegeben durch

$$\begin{aligned} H &= |\mu_B| \vec{B}_0 \vec{\sigma} \\ &= |\mu_B| B_0 \hat{n} \vec{\sigma}, \end{aligned}$$

wobei  $|\mu_B|$  das Bohr'sche Magneton und  $B_0$  eine Konstante sind. Es genügt

$$\tilde{H} = \hat{n} \vec{\sigma}$$

zu betrachten, wobei

$$\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$$

mit  $\sigma_i$  den Paulimatrizen ( $i \in \{x, y, z\}$ ), da die Eigenenergien von  $H$  und  $\tilde{H}$  bis auf Skalierung identisch sind.

#### 3.1.1 Lösung des Hamiltonoperators

Die Energieeigenwerte sind gegeben durch

$$\tilde{H}\psi = E\psi.$$

Zur Berechnung der Eigenenergien ist demnach Eigenwertproblem zu lösen

$$\begin{pmatrix} \cos \theta - E & \exp(-i\varphi) \sin \theta \\ \exp(i\varphi) \sin \theta & -\cos \theta - E \end{pmatrix} \psi = 0$$

und damit über  $\det(\tilde{H} - E) \stackrel{!}{=} 0$

$$\begin{aligned} -\cos^2 \theta + E^2 - \sin^2 \theta &= 0 \\ \Rightarrow E_{\downarrow/\uparrow} &= \pm 1. \end{aligned}$$

Die beiden Eigenenergien entsprechen einer Spinausrichtung parallel bzw. antiparallel zum äußeren Magnetfeld.

$\tilde{H}$  ist demnach für alle  $\theta$  nicht entartet.

Die Koeffizienten können durch Ablesen bestimmt

$$|\tilde{\psi}_{\downarrow/\uparrow}\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta \pm 1 \\ \exp(i\varphi) \sin \theta \end{pmatrix}$$

und anschließend normiert werden, sodass  $1 = N_{\downarrow/\uparrow}^{-2} \langle \tilde{\psi}_{\downarrow/\uparrow} | \tilde{\psi}_{\downarrow/\uparrow} \rangle$ .

$$\begin{aligned} \Rightarrow N_{\downarrow/\uparrow} &= \sqrt{\langle \tilde{\psi}_{\downarrow/\uparrow} | \tilde{\psi}_{\downarrow/\uparrow} \rangle} \\ &= \sqrt{\sin^2 \theta + (\cos \theta \pm 1)^2} \\ &= \sqrt{2} \sqrt{1 \pm \cos \theta}. \end{aligned}$$

Mit  $\sin \theta = \sqrt{1 - \cos \theta} \sqrt{1 + \cos \theta}$  für  $\theta \in [0, \pi]$  ergeben sich die normierten Eigenzustände zu

$$|\psi_{\downarrow/\uparrow}\rangle = \begin{pmatrix} \pm \sqrt{1 \pm \cos \theta} / \sqrt{2} \\ \exp(i\varphi) \sqrt{1 \mp \cos \theta} / \sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (3.1.1)$$

Die Eigenzustände hängen nur von  $\varphi$  und  $\theta$  ab. Der Parameterraum ist deswegen die zweidimensionale  $S^2$ . [11]

### 3.1.2 Bestimmung der Berry-Phase

Die Wellenfunktion des negativ geladenen Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchens erhält nach adiabatischer Variation des Magnetfeldes  $\vec{B}_0$  um eine Periode eine zusätzliche Phase  $\gamma_{\downarrow/\uparrow}$ , die für die reinen Zustände gegeben ist durch

$$\gamma_{\downarrow/\uparrow} = i \int_0^{2\pi} \langle \psi_{\downarrow/\uparrow} | \nabla_\varphi | \psi_{\downarrow/\uparrow} \rangle d\varphi. \quad (3.1.2)$$

Zunächst muss also  $\nabla_\varphi | \psi_{\downarrow/\uparrow} \rangle$  berechnet werden

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} | \psi_{\downarrow/\uparrow} \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ i \exp(i\varphi) \sqrt{1 \mp \cos \theta} / \sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

Einsetzen in (3.1.2) ergibt dann

$$\begin{aligned}\gamma_{\downarrow/\uparrow} &= i \int_0^{2\pi} \exp(-i\varphi) \sqrt{1 \mp \cos \theta} / \sqrt{2} i \exp(i\varphi) \sqrt{1 \mp \cos \theta} / \sqrt{2} d\varphi \\ &= -\frac{1}{2} 2\pi (1 \mp \cos \theta).\end{aligned}\quad (3.1.3)$$

### 3.1.3 Vergleich mit der vom Weg eingeschlossenen Fläche

Für die Fläche auf der Einheitskugel  $A$ , die von der Kreisbahn eingeschlossen wird, gilt

$$A = \int_A \vec{A} d\vec{a},$$

wobei  $\vec{A} = (\cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi \sin \theta, \cos \theta)$  und  $d\vec{a}$  der Flächenvektor.

$$\begin{aligned}&= \int_0^{2\pi} \int_0^\theta \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= 2\pi(1 - \cos \theta).\end{aligned}$$

Integriert man von  $\theta$  bis  $\pi$ , so ergibt sich

$$\begin{aligned}4\pi - A &= \int_0^{2\pi} \int_\theta^\pi \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= 2\pi(1 + \cos \theta).\end{aligned}$$

Vergleich mit (3.1.3) zeigt, dass

$$\gamma_{\downarrow} = -\frac{A}{2} \quad \text{und} \quad \tilde{\gamma}_{\uparrow} = -2\pi + \frac{A}{2}.\quad (3.1.4)$$

Die Berry-Phase  $\tilde{\gamma}_{\uparrow}$  stimmt mit der Phase

$$\gamma_{\uparrow} = \frac{A}{2}$$

überein, da  $\exp(-i2\pi) = 1$ , und somit

$$\gamma_{\downarrow/\uparrow} = \mp \frac{A}{2}.$$

Die Fläche  $A$  stimmt mit dem von dem Weg  $C$  aufgespannten Raumwinkel  $\Omega$  überein. Damit stimmt die doppelte Berry-Phase mit der Totalkrümmung des Parameterraums überein.

Für das Vektorfeld  $V_{\downarrow/\uparrow}$  ergibt sich

$$\begin{aligned}V_{\downarrow/\uparrow} &= \nabla \times A_{\downarrow/\uparrow} \\ &= \mp \frac{\hat{n}}{2}.\end{aligned}$$

Hier betrachtet man  $A_{\downarrow/\uparrow}(R, \varphi, \theta)$  und setzt anschließend  $R=1$ .

$V_{\downarrow/\uparrow}$  ist also radial symmetrisch. Der Fluss von  $V_{\downarrow/\uparrow}$  hängt bei festem Abstand des Weges vom Ursprung, also nur von der Größe der Fläche bzw. vom eingeschlossenen Raumwinkel ab.

Für die Berry-Phase gilt dann

$$\begin{aligned}\gamma_{\downarrow/\uparrow} &= \mp \int_C \frac{\hat{n}}{2} d\vec{a} \\ &= \mp \frac{A}{2}.\end{aligned}\tag{3.1.5}$$

Übertragen auf das Elektron bedeutet dies, dass  $\theta$  nicht notwendigerweise fest sein muss, sondern auch adiabatisch variiert werden darf. [4][11][12]

### 3.2 Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen mit Masse $m$

Betrachtet wird ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen mit Masse  $m$ , das sich auf einer Kreisbahn mit Radius  $R$  in der  $xy$ -Ebene durch das Monopolfeld  $\vec{B}_0$  (vgl. (3.0.1)) bewegt. Die Bewegung soll adiabatisch sein, d.h. das Teilchen bewegt sich mit einer sehr geringen Winkelgeschwindigkeit  $\dot{\varphi}$  im Vergleich zur Eigenfrequenz des Systems.

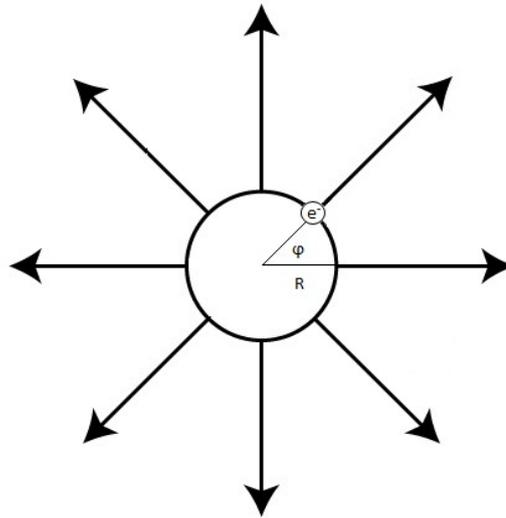


Abbildung 3.1: Für  $\theta = \frac{\pi}{2}$  ergibt sich für das Elektron obiges zylindersymmetrisches Magnetfeld.

Dieser Aufbau kann als ein Modell für ein Elektron, das sich durch ein Skyrmionengitter bewegt, aufgefasst werden. Durch die Wechselwirkung des Elektronenspins mit den Spins des Skyrmionengitter ändert sich das Skyrmionengitter langsam, was der adiabatischen Änderung des Magnetfeldes entspricht.

Gesucht sind die Eigenwerte und Eigenfunktionen des Hamiltonoperators  $H_0$  gegeben durch

$$H_0(\vec{r}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \vec{B}_0(\vec{r})\vec{\sigma} \quad \text{mit } \hat{p}^2 = -\nabla^2.$$

Die Bewegung findet in der xy-Ebene statt und somit  $\theta = \frac{\pi}{2}$  und  $R$  ist fest. Der Nablaoperator  $\nabla$  reduziert sich deswegen auf

$$\begin{aligned}\nabla &= e_r \frac{\partial}{\partial r} + e_\theta \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} + e_\varphi \frac{1}{R \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ &= e_\varphi \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \Rightarrow \nabla^2 &= \left( \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2.\end{aligned}$$

Mit (3.2.1) ergibt sich für den Hamiltonoperator

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2mR^2} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 + |\mu_B| \vec{B}_0(\vec{r}) \vec{\sigma} \quad (3.2.1)$$

$$= \frac{\hbar^2}{mR^2} \underbrace{\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 + \alpha \hat{n} \vec{\sigma} \right]}_{=: \tilde{H}_0} \quad \text{mit } \alpha = \frac{|\mu_B| B_0 m R^2}{\hbar^2} \quad (3.2.2)$$

$$= \frac{\hbar^2}{mR^2} \tilde{H}_0.$$

Im Folgenden wird  $\tilde{H}_0$  betrachtet, da sich der Hamiltonoperator  $\tilde{H}_0$  nur durch eine Konstante von  $H_0$  unterscheidet, sodass die Eigenwerte bis auf einen Faktor identisch sind.

Betrachtet man den Operator  $\tilde{p}$

$$\tilde{p} = -i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\sigma_z}{2},$$

so erkennt man, dass dieser Rotationen generiert, denn  $-i \frac{\partial}{\partial \varphi}$  dreht die Wellenfunktion um die z-Achse, während  $\frac{\sigma_z}{2}$  den Spin um die z-Achse dreht.

$\tilde{p}$  entspricht der Skalierung des Impulsoperators

$$p = -i \frac{\hbar}{R} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\hbar}{R} \frac{\sigma_z}{2}.$$

Da im Weiteren  $\tilde{p}$  betrachtet wird, gilt  $K = R\hbar^{-1}K_0$ , wobei  $K$  die Eigenwerte von  $\tilde{p}$  und  $K_0$  die von  $p$  sind.

$\tilde{H}_0$  und  $\tilde{p}$  kommutieren, da

$$\begin{aligned}[\tilde{H}_0, \tilde{p}] &= \left( -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 + \alpha \hat{n}(\varphi) \vec{\sigma} \right) \left( -i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\sigma_z}{2} \right) - \tilde{p} \tilde{H}_0 \\ &= \alpha \hat{n}(\varphi) \vec{\sigma} \frac{\sigma_z}{2} - \alpha \frac{\sigma_z}{2} \hat{n}(\varphi) \vec{\sigma} + i\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{n}(\varphi) \vec{\sigma} \\ &= -\alpha \left( \frac{\sigma_z}{2} \hat{n}(\varphi) \vec{\sigma} - \hat{n}(\varphi) \vec{\sigma} \frac{\sigma_z}{2} \right) + i\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{n}(\varphi) \vec{\sigma} \\ &= -\frac{\alpha}{2} \hat{n}(\varphi) ([\sigma_z, \sigma_x], [\sigma_z, \sigma_y], [\sigma_z, \sigma_z]) + i\alpha (-\sin \varphi \sin \theta \sigma_x + \cos \varphi \sin \theta \sigma_y, 0) \\ &= -i\alpha [\hat{n}(\varphi)(\sigma_y, -\sigma_x, 0) - \hat{n}(\varphi)(\sigma_y, -\sigma_x, 0)] \quad \text{da } [\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk} \sigma_k \\ &= 0.\end{aligned} \quad (3.2.3)$$

$\tilde{H}_0$  und  $\tilde{p}$  haben also ein gemeinsames Eigenfunktionensystem und man kann statt der Eigenfunktionen von  $\tilde{H}_0$  auch die Eigenfunktionen von  $\tilde{p}$  suchen. Die Eigenfunktionen von  $\tilde{H}_0$  sind eine Linearkombination der Eigenfunktionen von  $\tilde{p}$ . Dieses Vorgehen hat den Vorteil, dass man nur eine lineare Differenzialgleichung erster Ordnung anstelle einer linearen Differenzialgleichung zweiter Ordnung lösen muss.

Die Kommutativität von  $\tilde{H}_0$  und  $\tilde{p}$  bedeutet auch, dass

$$\langle \psi | \tilde{p} | \psi \rangle,$$

eine Erhaltungsgröße darstellt.

### 3.2.1 Lösung des Impulsoperators

Zuerst wird also folgende Differenzialgleichung gelöst

$$\left( -i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\sigma_z}{2} \right) |\psi\rangle = K |\psi\rangle.$$

Umformen ergibt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \varphi} |\psi\rangle &= i \left( K - \frac{\sigma_z}{2} \right) |\psi\rangle \\ &= \begin{pmatrix} i \left( K - \frac{1}{2} \right) & 0 \\ 0 & i \left( K + \frac{1}{2} \right) \end{pmatrix} |\psi\rangle. \end{aligned}$$

Die Eigenwerte ergeben sich durch Nullsetzen der Determinante

$$\begin{aligned} \det \left[ i \left( K - \frac{\sigma_z}{2} \right) - \lambda \right] &\stackrel{!}{=} 0 \\ \Rightarrow \lambda_{1/2} &= i \left( K \mp \frac{1}{2} \right). \end{aligned}$$

Damit lassen sich die zugehörigen Eigenfunktionen bestimmen

$$\begin{pmatrix} i \left( K - \frac{1}{2} \right) & 0 \\ 0 & i \left( K + \frac{1}{2} \right) \end{pmatrix} |\psi_{1/2}\rangle \stackrel{!}{=} \lambda_{1/2} |\psi_{1/2}\rangle$$

$$\Rightarrow |\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[ i \left( K - \frac{1}{2} \right) \varphi \right] \quad \text{und} \quad |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[ i \left( K + \frac{1}{2} \right) \varphi \right] \quad (3.2.4)$$

und damit schließlich die allgemeine Lösung der Differenzialgleichung für  $\tilde{p}$

$$|\psi(\varphi)\rangle = c_1 |\psi_1(\varphi)\rangle + c_2 |\psi_2(\varphi)\rangle. \quad (3.2.5)$$

Auf Grund der Symmetrie der Elektronenbahn gelten die periodischen Randbedingungen

$$\begin{aligned} |\psi(\varphi)\rangle &= |\psi(\varphi + 2\pi)\rangle \quad \forall \varphi \\ \Rightarrow 1 &= \exp \left[ 2\pi i \left( K \mp \frac{1}{2} \right) \right] \\ \Rightarrow K &= n + \frac{1}{2} \quad n \in \mathbb{Z}. \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

Der skalierte Impuls der Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen ist demnach quantisiert und tritt nur in ungeraden Vielfachen von  $\frac{1}{2}$  auf.

### 3.2.2 Lösung des Hamiltonoperators

Nach (3.2.3) kommutieren  $\tilde{p}$  und  $\tilde{H}_0$ .  $\psi(\varphi)$  ist also auch Eigenfunktion von  $\tilde{H}_0$  für geeignete  $c_i$ . Die zugehörigen Eigenenergien lassen sich durch Einsetzen von  $\psi(\varphi)$  in  $\tilde{H}_0$  berechnen.

$$\begin{aligned}\tilde{H}_0\psi(\varphi) &= \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)^2 + \alpha\hat{n}\vec{\sigma} \right] (c_1\psi_1 + c_2\psi_2) \\ &\stackrel{!}{=} E\psi(\varphi),\end{aligned}\tag{3.2.7}$$

wobei

$$\tilde{H}_0 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)^2 + \alpha \cos \theta & \alpha \exp(-i\varphi) \sin \theta \\ \alpha \exp(i\varphi) \sin \theta & -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)^2 - \alpha \cos \theta \end{pmatrix}.$$

Dies führt auf folgendes Eigenwertproblem mit den Eigenenergien E

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left( K - \frac{1}{2} \right)^2 + \alpha \cos \theta - E & \alpha \sin \theta \\ \alpha \sin \theta & \frac{1}{2} \left( K + \frac{1}{2} \right)^2 - \alpha \cos \theta - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0.\tag{3.2.8}$$

Im Weiteren werden zuerst die Energieeigenwerte E bestimmt

$$\begin{aligned}0 &\stackrel{!}{=} \det \left( \tilde{H}_0 - EI \right) \\ &= E^2 + E \left( -K^2 - \frac{1}{4} \right) + \alpha K \cos \theta - \alpha^2 + \frac{1}{4} \left( K^2 - \frac{1}{4} \right)^2 \\ \Rightarrow E_{\downarrow/\uparrow} &= \frac{K^2 + \frac{1}{4}}{2} \pm \sqrt{\frac{\left( K^2 + \frac{1}{4} \right)^2}{4} - \frac{1}{4} \left( K^2 - \frac{1}{4} \right)^2 - \alpha K \cos \theta + \alpha^2} \\ &= \frac{K^2 + \frac{1}{4}}{2} \pm \sqrt{\frac{K^2}{4} - \alpha K \cos \theta + \alpha^2}.\end{aligned}\tag{3.2.10}$$

Wenn der Wurzelterm verschwindet, gibt es für das zugehörige K für fest vorgegebenes E nur zwei Lösungen.

Für die Darstellung der Energie im Intervall  $[0, \pi]$  genügt es  $K > 0$  zu betrachten, denn

$$\begin{aligned}E_{\downarrow/\uparrow}(\alpha, \frac{\pi}{2} - \theta, K) &= \frac{K^2 + \frac{1}{4}}{2} \pm \sqrt{\frac{K^2}{4} - \alpha K \cos \left( \frac{\pi}{2} + \theta \right) + \alpha^2} \\ &= E_{\downarrow/\uparrow}(\alpha, \frac{\pi}{2} + \theta, -K).\end{aligned}$$

$E_{\downarrow/\uparrow}(\alpha, \theta, -K)$  ergibt sich demnach durch Spiegelung von  $E_{\downarrow/\uparrow}(\alpha, \theta, K)$  an der Achse  $\theta = \frac{\pi}{2}$ .

Alternativ genügt es auch das Winkelintervall  $[0, \frac{\pi}{2}]$  für  $K \in \mathbb{Z} + \frac{1}{2}$  zu betrachten, um alle möglichen Werte für E zu erhalten.

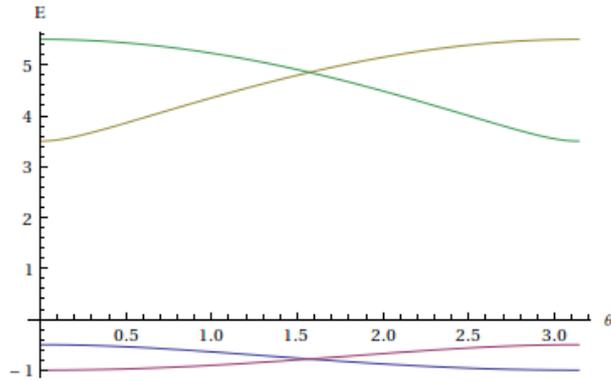


Abbildung 3.2: Dargestellt ist die Energie  $E_{\uparrow}$  gegen  $\theta$  für  $K = -\frac{5}{2}$  (blau),  $-\frac{1}{2}$  (rot),  $\frac{1}{2}$  (gelb),  $\frac{5}{2}$  (grün) und  $\alpha = 1$ .

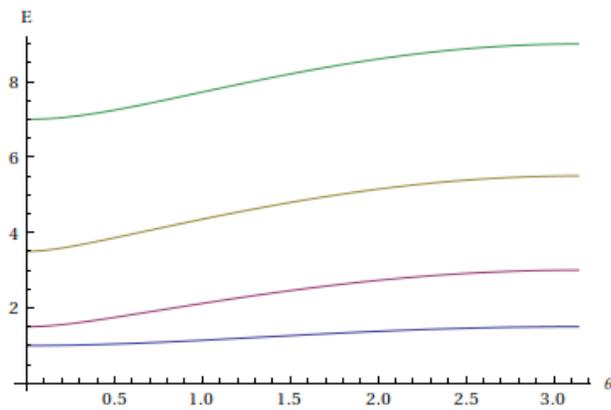


Abbildung 3.3: Dargestellt ist die Energie  $E_{\downarrow}$  gegen  $\theta$  für  $K = \frac{1}{2}$  (blau),  $\frac{3}{2}$  (rot),  $\frac{5}{2}$  (gelb),  $\frac{7}{2}$  (grün) und  $\alpha = 100$ .

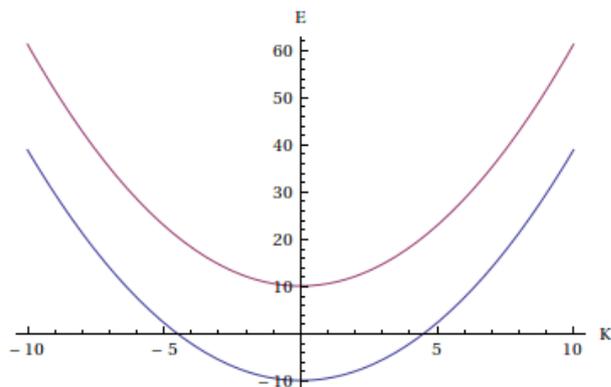


Abbildung 3.4: Dargestellt ist die Energie gegen  $K$  für  $\alpha = 10$ ,  $\theta = \frac{\pi}{2}$ . Man erkennt die Symmetrie zur Achse  $K = 0$ .

Einsetzen der Energiewerte  $E_{\downarrow/\uparrow}$  in (3.2.8) und Lösen des daraus resultierenden Gleichungssystems liefern die unnormierten Eigenzustände

$$\tilde{c}_{\downarrow/\uparrow} = \begin{pmatrix} \tilde{c}_{1\downarrow/\uparrow} \\ \tilde{c}_{2\downarrow/\uparrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} (K_{\downarrow/\uparrow} - \frac{1}{2})^2 + \alpha (\cos \theta + \sin \theta) - E_{\downarrow/\uparrow} \\ -\frac{1}{2} (K_{\downarrow/\uparrow} + \frac{1}{2})^2 + \alpha (\cos \theta - \sin \theta) + E_{\downarrow/\uparrow} \end{pmatrix}$$

und schließlich die normierten Eigenzustände

$$c_{\downarrow/\uparrow} = \frac{1}{N_{\downarrow/\uparrow}} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} (K_{\downarrow/\uparrow} - \frac{1}{2})^2 + \alpha (\cos \theta + \sin \theta) - E_{\downarrow/\uparrow} \\ -\frac{1}{2} (K_{\downarrow/\uparrow} + \frac{1}{2})^2 + \alpha (\cos \theta - \sin \theta) + E_{\downarrow/\uparrow} \end{pmatrix} \quad (3.2.11)$$

mit

$$N_{\downarrow/\uparrow} = \sqrt{\tilde{c}_{1\downarrow/\uparrow}^2 + \tilde{c}_{2\downarrow/\uparrow}^2}.$$

Mit (3.2.7) ergeben sich dann die vier Eigenzustände von  $\tilde{H}_0$ , da sowohl  $E_{\downarrow}$  als auch  $E_{\uparrow}$  für eine feste Energie E zwei mögliche Werte für K liefern, die gegebenenfalls komplex sein können.

Die exakten Lösungen für die vier Werte von K werden hier einfachheitshalber nicht als Formel angeben. Sie können jedoch durch Auflösen von (3.2.9) theoretisch bestimmt werden.

### 3.2.3 Das System bei fester Energie E

Gibt man dem System eine feste Energie E vor, so erhält man in Abhängigkeit der Energie null, einen, zwei, drei oder vier reelle Werte für K. Hierbei muss beachtet werden, dass die Energie E nicht beliebig gewählt werden kann, sondern wegen  $K = n + \frac{1}{2}$  mit  $n \in \mathbb{Z}$  quantisiert ist.

Sowohl  $E_{\downarrow}$  als auch  $E_{\uparrow}$  sind nach oben geöffnete "Parabeln" in Abhängigkeit von K. Es gibt also bei beiden einen Scheitelpunkt, der das Minimum  $E_{\downarrow/\uparrow min}$  von  $E_{\downarrow/\uparrow}$  darstellt. Liegt die vorgegebene Energie unter diesem Minimum, so sind die Werte für  $K_{\downarrow/\uparrow}$  komplex.

Bereich	reelle Lösungen
$E < E_{-min}$	0
$E = E_{-min}$	1
$E_{-min} < E < E_{+min}$	2
$E = E_{+min}$	3
$E_{+min} < E$	4

(3.2.12)

Bei zwei reellen Werten von K ist eine Spinausrichtung parallel zum Feld mit zwei Bewegungsrichtungen möglich.

Bei vier reellen Werten von K ist eine Spinausrichtung parallel und antiparallel zum Feld mit je zwei Bewegungsrichtungen möglich.

Ein und drei reelle Werte für K entsprechen einer Entartung von  $E_{\downarrow}$  bzw.  $E_{\uparrow}$ .

Wegen  $E_{\downarrow min} \geq \alpha$  und  $E_{\uparrow min} \leq -\alpha + \frac{1}{2}$  gilt

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_{\downarrow min} - E_{\uparrow min} \\ &\geq 2\alpha - \frac{1}{2}, \end{aligned}$$

d.h. der Bereich, in dem zwei reelle Lösungen für  $K$  existieren, wächst mit größer werdendem  $\alpha$ .

## 4 Näherungslösung

In diesem Kapitel werden Näherungslösungen der Eigenenergien des Hamiltonoperators  $\tilde{H}_0$  für große  $\alpha$  gesucht, um mit diesen zu zeigen, dass sich das System für große  $\alpha$  (also  $R \rightarrow \infty$ ) adiabatisch verhält.

### 4.1 Genäherte Energieniveaus

Für  $\alpha \rightarrow \infty$  lässt sich (3.2.10) entwickeln

$$\begin{aligned} E_{\downarrow/\uparrow} &= \frac{K^2 + \frac{1}{4}}{2} \pm \alpha \sqrt{1 - \frac{K \cos \theta}{\alpha} + \frac{K^2}{4\alpha^2}} \\ &= \frac{K^2 + \frac{1}{4}}{2} \pm \alpha \left( 1 - \frac{K \cos \theta}{2\alpha} + \mathcal{O}(\alpha^{-2}) \right) \\ &= \pm \alpha + \frac{1}{2} \left[ \left( K \mp \frac{1}{2} \cos \theta \right)^2 + \frac{1}{4} (1 - \cos^2 \theta) \right]. \end{aligned} \quad (4.1.1)$$

Nach (3.2.6) gilt

$$K = n + \frac{1}{2}$$

und damit

$$E_{\downarrow/\uparrow} = \pm \alpha + \frac{1}{2} \left[ \left( n + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \cos \theta \right)^2 + \frac{1}{4} (1 - \cos^2 \theta) \right].$$

Einsetzen von (3.1.3) ergibt

$$= \pm \alpha + \frac{1}{2} \left[ \left( n - \frac{\gamma_{\downarrow/\uparrow}}{2\pi} \right)^2 + \frac{\gamma_{\downarrow}\gamma_{\uparrow}}{4\pi^2} \right] \quad (4.1.2)$$

Alternativ hätte man (3.2.10) auch für ( $R \rightarrow \infty$ ) entwickeln, können und wäre für  $R=1$  ebenfalls zu dem Ergebnis (4.1.2) gelangt.

### 4.2 Adiabatischer Ansatz

Betrachtet man einen reinen Zustand  $\psi(\varphi_0 = 0)$  zur Zeit  $t_0$  und ändert den Systemparameter  $\varphi(t)$  adiabatisch, so ist nach dem Adiabatensatz zu erwarten, dass sich der Zustand  $|\psi(t)\rangle$  entlang des sich zeitlich ändernden Eigenzustandes mit einer zusätzlichen Phase entwickelt. Man macht also folgenden Ansatz

$$|\xi_{\downarrow/\uparrow}(\varphi)\rangle = \phi_{\downarrow/\uparrow}(\varphi) |\psi_{\downarrow/\uparrow}\rangle, \quad (4.2.1)$$

mit

$$\hat{n}\vec{\sigma}|\psi_{\downarrow/\uparrow}\rangle = \pm|\psi_{\downarrow/\uparrow}\rangle.$$

$|\psi_{\downarrow/\uparrow}\rangle$  sind also die sich zeitlich ändernden Eigenzustände von  $\tilde{H}$ .  $\phi_{\downarrow/\uparrow}(\varphi)$  beschreibt die zusätzliche Phase, die sich nach dem Adiabatensatz ergibt.

Den Ansatz (4.2.1) setzt man in  $\tilde{H}_0$  ein

$$\begin{aligned}\tilde{H}_0|\xi_{\downarrow/\uparrow}(\varphi)\rangle &= \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + \alpha\hat{n}\vec{\sigma}\right]|\xi_{\downarrow/\uparrow}(\varphi)\rangle \\ &= \left[-\frac{\phi''_{\downarrow/\uparrow}}{2} - \phi'_{\downarrow/\uparrow}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\phi_{\downarrow/\uparrow}}{2}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^2 \pm \alpha\phi_{\downarrow/\uparrow}\right]|\psi_{\downarrow/\uparrow}\rangle.\end{aligned}$$

Linksmultiplikation mit  $\langle\psi_{\downarrow/\uparrow}|$  liefert mit  $\tilde{H}_0|\xi_{\downarrow/\uparrow}\rangle = E|\xi_{\downarrow/\uparrow}\rangle$

$$E\phi_{\downarrow/\uparrow} = -\frac{\phi''_{\downarrow/\uparrow}}{2} - \phi'_{\downarrow/\uparrow}\langle\psi_{\downarrow/\uparrow}|\frac{\partial}{\partial\varphi}|\psi_{\downarrow/\uparrow}\rangle - \frac{\phi_{\downarrow/\uparrow}}{2}\langle\psi_{\downarrow/\uparrow}|\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}|\psi_{\downarrow/\uparrow}\rangle \pm \alpha\phi_{\downarrow/\uparrow}.$$

Mit  $A_{\downarrow/\uparrow} = i\langle\psi_{\downarrow/\uparrow}|\frac{\partial}{\partial\varphi}|\psi_{\downarrow/\uparrow}\rangle$  ergibt sich

$$\begin{aligned}&= \frac{1}{2}\left[-\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + 2iA_{\downarrow/\uparrow}\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}A_{\downarrow/\uparrow}\right) + i\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}A_{\downarrow/\uparrow}\right) - \langle\psi_{\downarrow/\uparrow}|\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}|\psi_{\downarrow/\uparrow}\rangle \pm 2\alpha\right]\phi_{\downarrow/\uparrow} \\ &= \frac{1}{2}\left[\left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} - A_{\downarrow/\uparrow}\right)^2 - i\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}A_{\downarrow/\uparrow}\right) - A_{\downarrow/\uparrow}^2 - \langle\psi_{\downarrow/\uparrow}|\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}|\psi_{\downarrow/\uparrow}\rangle \pm 2\alpha\right]\phi_{\downarrow/\uparrow}.\end{aligned}\tag{4.2.2}$$

Nach (3.1.3) gilt

$$\begin{aligned}A_{\downarrow/\uparrow} &= -\frac{1}{2}(1 \mp \cos\theta) \\ &= -\frac{\gamma_{\downarrow/\uparrow}}{2\pi}\end{aligned}$$

und damit

$$\frac{\partial}{\partial\varphi}A_{\downarrow/\uparrow} = 0.$$

Nach (3.1.1) lässt sich

$$\langle\psi_{\downarrow/\uparrow}|\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}|\psi_{\downarrow/\uparrow}\rangle = -\frac{1}{2}(1 \mp \cos\theta)$$

berechnen.

Einsetzen in 4.2.2 ergibt

$$\begin{aligned}E\phi_{\downarrow/\uparrow} &= \frac{1}{2}\left[\left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{1}{2}(1 \mp \cos\theta)\right)^2 - \frac{1}{4}(1 \mp 2\cos\theta + \cos^2\theta) + \frac{1}{2}(1 \mp \cos\theta) \pm 2\alpha\right]\phi_{\downarrow/\uparrow} \\ &= \frac{1}{2}\left[\left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{1}{2}(1 \mp \cos\theta)\right)^2 + \frac{1}{4}(1 - \cos^2\theta) \pm 2\alpha\right]\phi_{\downarrow/\uparrow} \\ &\stackrel{3.1.3}{=} \frac{1}{2}\left[\left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\gamma_{\pm}}{2\pi}\right)^2 + \frac{\gamma_+\gamma_-}{4\pi^2} \pm 2\alpha\right]\phi_{\downarrow/\uparrow}.\end{aligned}$$

Damit ergibt sich das Eigenwertproblem

$$\frac{1}{2} \left[ \left( -i \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{\gamma_{\pm}}{2\pi} \right)^2 + \frac{\gamma_+ \gamma_-}{4\pi^2} \pm 2\alpha \right] \phi_{\downarrow/\uparrow} = E \phi_{\downarrow/\uparrow}. \quad (4.2.3)$$

[13][12]

Wegen der Periodizität der Eigenfunktionen  $\xi_{\downarrow/\uparrow}$  bezüglich  $2\pi$  macht man den Ansatz

$$\phi_{\downarrow/\uparrow}(\varphi) = C \exp(in\varphi) \quad n \in \mathbb{Z}, C \in \mathbb{C}.$$

Diesen setzt man in (4.2.3) ein

$$\begin{aligned} \Rightarrow E \phi_{\downarrow/\uparrow} &= \frac{1}{2} \left[ \left( -i \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{\gamma_{\downarrow/\uparrow}}{2\pi} \right) \left( n - \frac{\gamma_{\downarrow/\uparrow}}{2\pi} \right) + \frac{\gamma_{\downarrow} \gamma_{\uparrow}}{4\pi^2} \pm 2\alpha \right] \phi_{\downarrow/\uparrow} \\ \Rightarrow E \phi_{\downarrow/\uparrow} &\Rightarrow \frac{1}{2} \left[ \left( n^2 - 2 \frac{\gamma_{\downarrow/\uparrow} n}{2\pi} + \frac{\gamma_{\downarrow/\uparrow}^2}{4\pi^2} \right) + \frac{\gamma_{\downarrow} \gamma_{\uparrow}}{4\pi^2} \pm 2\alpha \right] \phi_{\downarrow/\uparrow} \\ \Rightarrow E \phi_{\downarrow/\uparrow} &= \frac{1}{2} \left[ \left( n - \frac{\gamma_{\downarrow/\uparrow}}{2\pi} \right)^2 + \frac{\gamma_{\downarrow} \gamma_{\uparrow}}{4\pi} \pm 2\alpha \right] \phi_{\downarrow/\uparrow}. \end{aligned}$$

Damit ergibt sich eine Formel für die Eigenenergien

$$E_{\downarrow/\uparrow} = \frac{1}{2} \left[ \left( n - \frac{\gamma_{\downarrow/\uparrow}}{2\pi} \right)^2 + \frac{\gamma_{\downarrow} \gamma_{\uparrow}}{4\pi} \right] \pm \alpha. \quad (4.2.4)$$

Vergleicht man die Formel (4.2.4) mit (4.1.2), so stellt man fest, dass beide identisch sind. Es lässt sich demnach schlussfolgern, dass sich das System, in dem  $\alpha$  und  $E$  beliebig groß werden, adiabatisch verhält.



## 5 Deltapotenzialstörung

Im Folgenden wird der Hamiltonoperator  $\tilde{H}_0$  durch ein Deltapotenzial gestört. Diese Störung entspricht einer Störstelle im Skymion, an der der Spin des Elektrons streut. Anschließend berechnet man die Spinfliprate, also die Wahrscheinlichkeit, mit der der Spin bei der Streuung flipt.

Für  $\alpha$  bzw.  $R \rightarrow \infty$  erwartet man Spinerhaltung und demnach ein adiabatisches Verhalten des Systems.

Der gestörte Hamiltonoperator ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned} H_1 &= H_0 + V_0 \delta(R(\varphi - \pi)) \\ \Rightarrow H_1 &= \frac{\hbar^2}{mR^2} \underbrace{\left( \tilde{H}_0 + V \delta(\varphi - \pi) \right)}_{\tilde{H}_1} \quad \text{mit } V = \frac{mR}{\hbar^2} \\ \Rightarrow H_1 &= \frac{\hbar^2}{mR^2} \tilde{H}_1. \end{aligned} \quad (5.0.1)$$

### 5.1 Anschlussbedingungen

Untersucht werden die Bedingungen für die Lösungen  $\eta$  von  $\tilde{H}_1$ .  
Zu lösen ist

$$\tilde{H}_1 \eta = E \eta. \quad (5.1.1)$$

Wegen der  $2\pi$ -Periodizität von  $\eta$  muss gelten

$$\eta(0) = \eta(2\pi) \quad (5.1.2)$$

$$\eta'(0) = \eta'(2\pi) \quad (5.1.3)$$

und wegen der Stetigkeit von  $\eta$

$$\eta(\pi^+) = \eta(\pi^-). \quad (5.1.4)$$

Da das Deltapotenzial unendlich hoch ist, ergibt sich ein Sprung der ersten Ableitung  $\eta'$  an der Stelle  $\pi$ , dessen Wert zunächst berechnet wird.

Auflösen von (5.1.1) nach der zweiten Ableitung nach  $\varphi$  ergibt

$$\left( \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)^2 \eta = -2(\alpha \hat{n} \vec{\sigma} + V_0 \delta(\varphi - \pi) + E) \eta.$$

Integration über eine  $\epsilon$ -Umgebung um  $\pi$  führt zu

$$\eta'(\pi + \epsilon) - \eta'(\pi - \epsilon) = -2 \int_{\pi - \epsilon}^{\pi + \epsilon} (\alpha \hat{n} \vec{\sigma} + V_0 \delta(\varphi - \pi) + E) \eta d\varphi$$

Für  $\epsilon \rightarrow 0$  ergibt sich wegen der Stetigkeit von  $\alpha \hat{n} \vec{\sigma} \eta$  und  $E\eta$

$$\eta'(\pi^+) - \eta'(\pi^-) = -2V_0\eta(\pi). \quad (5.1.5)$$

[14]

## 5.2 Streuung eines reinen Zustands

In diesem Abschnitt wird ein negativ geladenes Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen in einer Dimension betrachtet, das an einem Deltapotenzial streut. Dabei nimmt man an, dass das Teilchen vor der Streuung im Zustand  $\psi_{\uparrow}(n_{\uparrow r} + \frac{1}{2}) =: \psi_{\uparrow r}$  ist, d.h. es bewegt sich entlang größer werdendem  $\varphi$ . Die periodischen Randbedingungen werden vernachlässigt, weil die Koeffizienten der gestreuten Welle bereits durch die Anschlussbedingungen eindeutig bestimmt sind.

Man macht also folgenden Ansatz für die Wellenfunktion

$$\eta(\varphi) = \begin{cases} \psi_{\uparrow r} + a_{\uparrow l} \psi_{\uparrow l} + a_{\downarrow l} \psi_{\downarrow l} & \varphi < \pi \\ a_{\uparrow r} \psi_{\uparrow r} + a_{\downarrow r} \psi_{\downarrow r} & \varphi \geq \pi \end{cases}.$$

Mit der Stetigkeit von  $\eta$  (5.1.4) und dem Sprung von  $\eta'$  (5.1.5) an der Stelle  $\pi$  ergibt sich dann das lineare Gleichungssystem für den Koeffizientenvektor  $\vec{a} = (a_{\downarrow r}, a_{\downarrow l}, a_{\uparrow r}, a_{\uparrow l})^T$  der gestreuten Welle

$$M\vec{a} = \vec{b}, \quad (5.2.1)$$

wobei

$$M = \begin{pmatrix} \vec{m}_1^T \\ \vec{m}_2^T \\ \vec{m}_3^T \\ \vec{m}_4^T \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} c_{1\uparrow r} \\ c_{2\uparrow r} \\ c_{1\uparrow r} i n_{\uparrow r} \\ c_{1\uparrow r} i (n_{\uparrow r} + 1) \end{pmatrix}$$

mit

$$\vec{m}_1 = \begin{pmatrix} (-1)^{n_{\downarrow r} - n_{\uparrow r}} c_{\downarrow r} \\ -(-1)^{n_{\downarrow l} - n_{\uparrow r}} c_{\downarrow l} \\ c_{1\uparrow r} \\ -(-1)^{n_{\uparrow l} - n_{\uparrow r}} c_{1\uparrow l} \end{pmatrix}, \quad \vec{m}_3 = \begin{pmatrix} (-1)^{n_{\downarrow r} - n_{\uparrow r}} c_{1\downarrow r} (i n_{\downarrow r} + 2V) \\ -(-1)^{n_{\downarrow l} - n_{\uparrow r}} c_{1\downarrow l} i n_{\downarrow l} \\ c_{1\uparrow r} (i n_{\uparrow r} + 2V) \\ -(-1)^{n_{\uparrow l} - n_{\uparrow r}} c_{1\uparrow l} i n_{\uparrow l} \end{pmatrix},$$

$$\vec{m}_2 = \begin{pmatrix} (-1)^{n_{\downarrow r} - n_{\uparrow r}} c_{2\downarrow r} \\ -(-1)^{n_{\downarrow l} - n_{\uparrow r}} c_{2\downarrow l} \\ c_{2\uparrow r} \\ -(-1)^{n_{\uparrow l} - n_{\uparrow r}} c_{2\uparrow l} \end{pmatrix}, \quad \vec{m}_4 = \begin{pmatrix} (-1)^{n_{\downarrow r} - n_{\uparrow r}} c_{2\downarrow r} [i(n_{\downarrow r} + 1) + 2V] \\ -(-1)^{n_{\downarrow l} - n_{\uparrow r}} c_{2\downarrow l} i(n_{\downarrow l} + 1) \\ c_{2\uparrow r} [i(n_{\uparrow r} + 1) + 2V] \\ -(-1)^{n_{\uparrow l} - n_{\uparrow r}} c_{2\uparrow l} i(n_{\uparrow l} + 1) \end{pmatrix}.$$

Zur Vereinfachung der Notation wird  $c_{1\downarrow r} := c_{1\downarrow r}(K_{\downarrow r}) = c_{1\downarrow}(n_{\downarrow r} + \frac{1}{2})$  usw. gesetzt.

Einfachheitshalber benutzt man hier nicht die Koeffizienten aus (3.2.11), sondern

$$\begin{pmatrix} c_{1\downarrow/\uparrow} \\ c_{2\downarrow/\uparrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left[ \mp \left( \frac{K_{\downarrow/\uparrow}}{2} - \alpha \cos \theta \right) \pm \sqrt{\frac{K_{\downarrow/\uparrow}^2}{4} - K_{\downarrow/\uparrow} \alpha \cos \theta + \alpha^2} \right] / (\alpha \sin \theta) \\ 1 \end{pmatrix},$$

da hier  $c_{2\downarrow/\uparrow}$  unabhängig von  $n_{\downarrow/\uparrow}$  sind.

Für  $\theta=0$ , was einer ferromagnetischen Struktur entspricht, erhält man die allgemeine Lösung des Gleichungssystems

$$\vec{a}(\theta = 0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{n_{\uparrow r} - n_{\uparrow l}}{n_{\uparrow r} - n_{\uparrow l} - 2iV} \\ \frac{2i(-1)^{n_{\uparrow r} - n_{\uparrow l}} V}{n_{\uparrow r} - n_{\uparrow l} - 2iV} \end{pmatrix}$$

mit den  $n_{\uparrow/\downarrow r/l}$ , die sich als Lösung von (3.2.10) ergeben.

Es findet also kein Spinflip statt. Das Teilchen behält seinen Spin und kann lediglich transmittiert oder reflektiert werden.

Man erkennt, dass für eine feste Energie  $E$  und  $V \rightarrow \infty$ , also für ein beliebig großes Potenzial, die dritte Komponente von  $\vec{a}$  verschwindet und die vierte gegen eins geht. Das Teilchen wird bei einem beliebig großen Potenzial demnach mit einer Wahrscheinlichkeit von eins reflektiert.

Entwickelt man die Lösung des Gleichungssystems für beliebig großes  $\alpha$  bzw.  $R$ , so erhält man

$$\vec{a}(\alpha \rightarrow \infty) \rightarrow \vec{a}(\theta = 0).$$

In Übereinstimmung mit Kapitel 4 verhält sich das System für große  $\alpha$  adiabatisch. Wählt man  $\alpha$  und damit bei festem Magnetfeld  $B_0$  den Radius  $R$  beliebig groß, so wird  $\nabla\varphi=R^{-1}$  beliebig klein. Das Magnetfeld nähert sich dabei immer mehr einer ferromagnetischen Struktur an.

### 5.3 Berechnung der Spinfliprate

Gesucht ist die exakte Spinfliprate  $\Gamma_{SF}$  für die Streuung des Zustands  $\psi_{\uparrow r}$ .

$$\Gamma_{SF} = \frac{j_{out}}{j_{in}}$$

mit  $j_{out}$  dem spingeflippten aus- und  $j_{in}$  dem einlaufenden Strom.

Allgemein ist der Strom einer Wellenfunktion  $\psi$  gegeben durch

$$j_0 = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi]. \quad (5.3.1)$$

Um die richtigen Einheiten zu erhalten, wird auch  $j_0$  mit einem Faktor  $\frac{\hbar^2}{mR^2}$  skaliert. Die Vorfaktoren sind hier jedoch zweitrangig, da sie sich bei  $\Gamma_{SF}$  ohnehin herauskürzen.

Eine Eigenfunktion  $\psi_{\uparrow/\downarrow r/l}$  von  $\tilde{H}_0$  zur Energie  $E$  erzeugt demnach den Strom

$$j_{\uparrow/\downarrow r/l} = \frac{R^2}{2i\hbar} [|c_{1\uparrow/\downarrow r/l}|^2 n_{\uparrow/\downarrow r/l} + |c_{2\uparrow/\downarrow r/l}|^2 (n_{\uparrow/\downarrow r/l} + 1)].$$

Das Gleichungssystem (5.2.1) lässt sich allgemein für beliebige  $\alpha$ ,  $\theta$ ,  $V$  und  $E$  lösen und die Spinfliprate berechnen. Der Einfachheit halber wird auf die Darstellung der Formel für die Spinfliprate verzichtet. Auf den vorigen beiden Seiten ist sie grafisch dargestellt, wobei in jeder Abbildung immer nur ein Parameter variiert wird.

In den folgenden Unterkapiteln wird nach Näherungslösungen für die Spinfliprate in bestimmten Bereichen gesucht, die zunächst in den skalierten Einheiten betrachtet werden und anschließend reskaliert werden.

Für die Näherungslösungen benötigt man jedoch die Abhängigkeiten von  $R$ , die gegeben sind durch

$$\begin{aligned} V &\propto R \\ E &\propto R^2 \\ n &\propto R \end{aligned}$$

Die Proportionalität von  $\alpha$  zu  $R$  hängt davon ab, wie man die Abhängigkeit von  $B_0$  wählt.

### 5.3.1 Näherung für $\nabla\varphi \rightarrow 0$

Im Weiteren wird untersucht, wie sich die Spinfliprate verhält, wenn man  $\nabla\varphi$  des Magnetfeldes beliebig klein macht und die übrigen Parameter fest vorgibt. In dem hier betrachteten System gilt  $(\nabla\varphi)^{-1} = R$ . Dies ist äquivalent zu dem Fall, dass  $\alpha \rightarrow \infty$ . Man entwickelt also die Spinfliprate für große  $R$ , indem man den Strom und die Komponenten der gestreuten Wellenfunktion getrennt für große  $R$  entwickelt. Entwickelt man die Komponenten  $\vec{a}$  der gestreuten Wellenfunktion in erster Ordnung, so genügt es, den Strom in nullter Ordnung zu betrachten.

$$\frac{j_{\downarrow r/l}}{j_{\uparrow r/l}} = \frac{n_{\downarrow r/l} \sin^2 \frac{\theta}{2}}{n_{\uparrow r/l} \cos^2 \frac{\theta}{2}},$$

wobei  $n_{\downarrow/\uparrow r/l}$  in diesem Bereich in nullter Ordnung, also als ferrromagnetisch betrachtet werden darf. Das ist hier erlaubt, weil sich das System für große  $R$  verhält als läge eine ferromagnetische Struktur vor. Zusätzlich darf  $n_{\downarrow/\uparrow r/l} = K_{\downarrow/\uparrow r/l}$  benutzt werden, da  $\alpha$  beliebig groß ist.

$$\begin{aligned} n_{\downarrow r/l} &= \pm \sqrt{2(E - \alpha)} \\ n_{\uparrow r/l} &= \pm \sqrt{2(E + \alpha)} \end{aligned}$$

Damit ergibt sich schließlich eine genäherte Spinfliprate  $\Gamma_{SF}^1$ .

$$\Gamma_{SF}^1 = \frac{V^2(2E + V^2)\sqrt{E - \alpha}\sqrt{E + \alpha}}{2\alpha^2(4E^2 + 4EV^2 + V^4 - 4\alpha^2)} \sin^2 \theta. \quad (5.3.2)$$

In Abbildung (5.7) erkennt man, dass die Spinfliprate für kleine Streupotenziale ansteigt, bevor sie gegen null geht. Je kleiner das Streupotenzial im Vergleich zu  $E$  gewählt wird, desto stärker ist der Anstieg. Dieses Verhalten tritt ebenfalls bei der exakten Spinfliprate

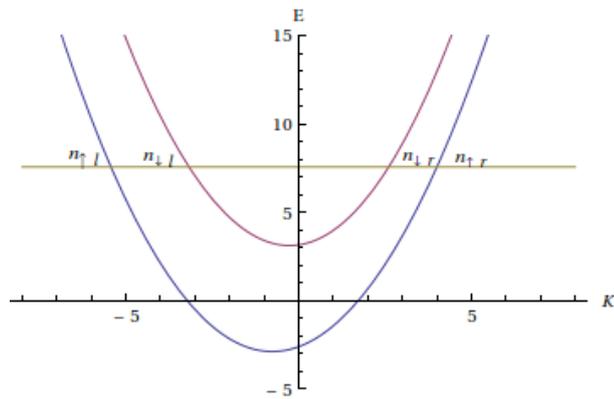


Abbildung 5.1: Dargestellt ist Energie gegen  $n$  zur Verdeutlichung der Notation  $n_{\downarrow/\uparrow r/l}$  bei fest vorgegebem  $E$ .

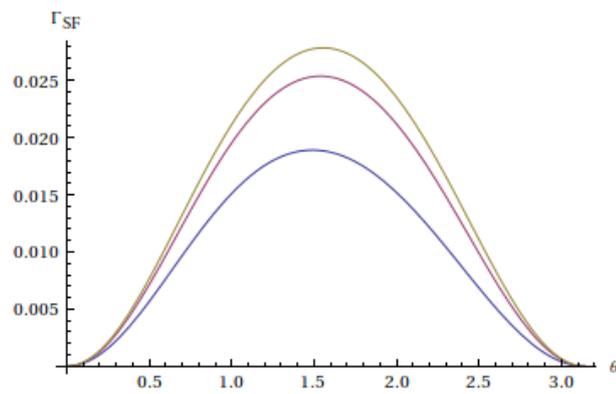


Abbildung 5.2: Dargestellt ist die Spinfliprate  $\Gamma_{SF}$  gegen  $\theta$  für  $\alpha = 100$ ,  $V = 5$ (blau),  $10$ (rot),  $100$ (gelb) und  $E = 102$ .

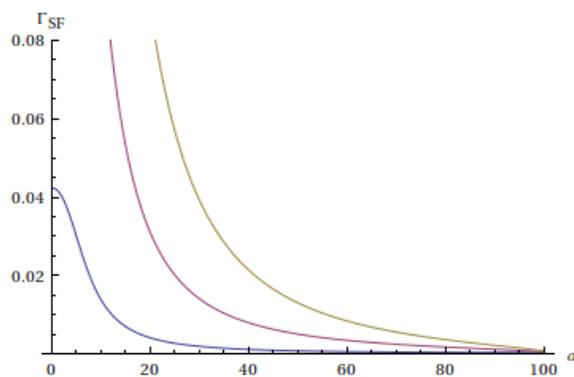


Abbildung 5.3: Dargestellt ist die Spinfliprate  $\Gamma_{SF}$  für  $\theta = \frac{\pi}{3}$ ,  $V = 3$ (blau),  $10$ (rot),  $100$ (gelb) und  $E = 102$ .

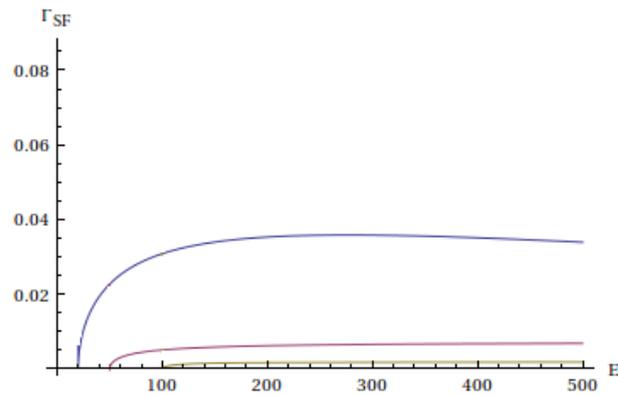


Abbildung 5.4: Dargestellt ist die Spinfliprate  $\Gamma_{SF}$  gegen  $E$  für  $\alpha = 20$ (blau),  $50$ (rot),  $100$ (gelb),  $\theta = \frac{\pi}{3}$  und  $V = 10$ .

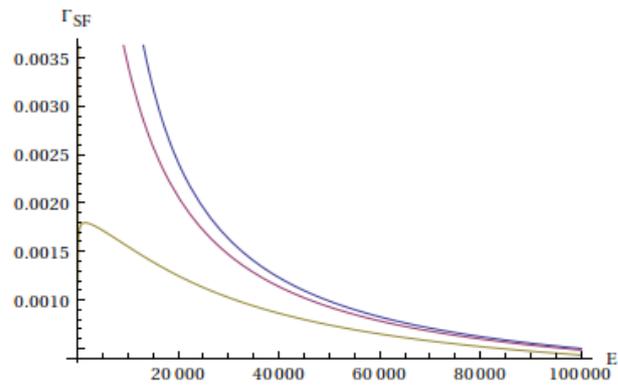


Abbildung 5.5: Dargestellt ist die Spinfliprate  $\Gamma_{SF}$  gegen  $E$  für  $\alpha = 20$ (blau),  $50$ (rot),  $100$ (gelb),  $\theta = \frac{\pi}{3}$  und  $V = 10$ .

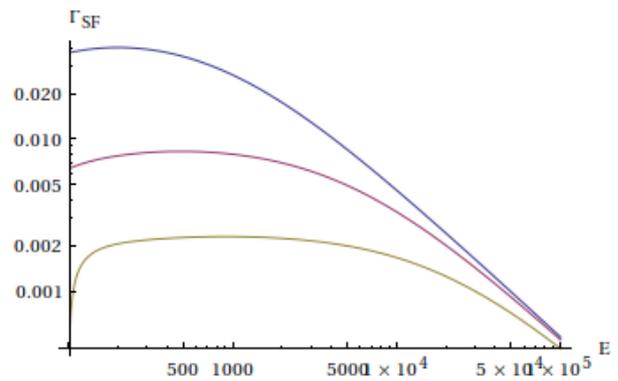


Abbildung 5.6: Dargestellt ist  $\log(\Gamma_{SF})$  gegen  $\log(E)$  für  $\alpha = 50$ (blau),  $100$ (rot),  $120$ (gelb),  $\theta = \frac{\pi}{2}$  und  $V = 10$ . Für große  $E$  gilt demnach  $E \propto E^m$ .

auf. Um dieses Verhalten zu verstehen, betrachtet man  $\Gamma_{SF}^1$  im Bereich  $\alpha \approx E$ . Für  $E \gg V^2$  gilt dann

$$\begin{aligned} \Gamma_{SF}^1(\alpha \approx E) &\approx \begin{cases} \frac{V^2 2E \sqrt{E-\alpha} \sqrt{E+\alpha}}{2\alpha^2 4EV^2} \sin^2 \theta & \text{für } E - \alpha < V^2 \\ \frac{V^2 2E \sqrt{E-\alpha} \sqrt{E+\alpha}}{2\alpha^2 (E^2 - \alpha^2)} \sin^2 \theta & \text{für } E - \alpha > V^2 \end{cases} \\ &\approx \begin{cases} \frac{\sqrt{2} \sqrt{E-\alpha}}{4\alpha^{3/2}} \sin^2 \theta & \text{für } E - \alpha < V^2 \\ \frac{V^2}{\sqrt{2} \sqrt{E-\alpha} \alpha^{3/2}} \sin^2 \theta & \text{für } E - \alpha > V^2 \end{cases} \end{aligned}$$

### 5.3.2 Näherung für $1 \ll \alpha \ll \sqrt{E}$

Es wird der Bereich

$$\frac{\hbar^2 (\nabla \varphi)^2}{2m} \ll |\mu_B| B_0 \ll \sqrt{E_0} \frac{\hbar^2 (\nabla \varphi)^2}{2m} \quad (5.3.3)$$

im Ausgangssystem betrachtet. Dies bedeutet im skalierten System

$$1 \ll \alpha \ll \sqrt{E}$$

Damit (5.3.3) für großes R immer erfüllt ist, wählt man  $B_0 \propto R^{-3/2}$  und dementsprechend  $\alpha \propto R^{1/2}$ . Für  $R \rightarrow \infty$  befindet man sich in einem Bereich sehr schwacher magnetischer Felder.

Zunächst lassen sich die Ströme für diesen Bereich um  $R \rightarrow \infty$  entwickeln.

$$\begin{aligned} j_{\downarrow r} &= n_{\downarrow r} R + \frac{2n_{\downarrow r} + \alpha^2 (1 - \cos 2\theta)}{2n_{\downarrow r}} \\ j_{\downarrow l} &= -\frac{4(n_{\downarrow l}^2 \cot \theta)}{\alpha \sin \theta} R^{3/2} + \frac{n_{\downarrow l}^3}{\alpha^2 \sin^2 \theta} R^2 \\ j_{\uparrow r} &= -\frac{4(n_{\uparrow r}^2 \cot \theta)}{\alpha \sin \theta} R^{3/2} + \frac{n_{\uparrow r}^3}{\alpha^2 \sin^2 \theta} R^2. \end{aligned}$$

Dies Ströme  $j_{\downarrow l}$  und  $j_{\uparrow r}$  stimmen in dieser Näherung formal überein. Sie unterscheiden sich jedoch über  $n_{\downarrow l}$  und  $n_{\uparrow r}$  und damit über die Abhängigkeit der Energie der ein- bzw. auslaufenden Teilchen.

Für die Entwicklung der Werte für  $n = K - \frac{1}{2}$  startet man erneut bei der Gleichung (3.2.10), die in führender Ordnung von R gegeben ist durch

$$\begin{aligned} E^2 - K^2 E^2 + \frac{1}{4} K^4 &= 0 \\ \Rightarrow K &= \pm \sqrt{2E}. \end{aligned}$$

mit dem Ansatz

$$K = \pm \sqrt{2E} + \delta K$$

erhält man dann schließlich für  $R=1$ , also in reskalierten Einheiten

$$\begin{aligned} n_{\downarrow r/l} &= \mp 1 \pm \sqrt{2E} + \frac{\alpha \cos \theta}{\sqrt{2E}} \\ n_{\uparrow r/l} &= \pm 1 \pm \sqrt{2E} - \frac{\alpha \cos \theta}{\sqrt{2E}}. \end{aligned}$$

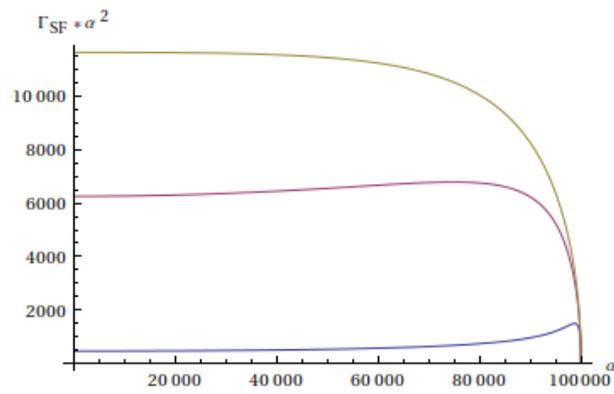


Abbildung 5.7: Dargestellt ist  $\Gamma_{SF}^2 \cdot \alpha^2$  gegen  $\alpha$  für  $\theta = \frac{\pi}{3}$ ,  $V = 50$  (blau),  $200$  (rot),  $300$  (gelb) und  $E = 100000$ .

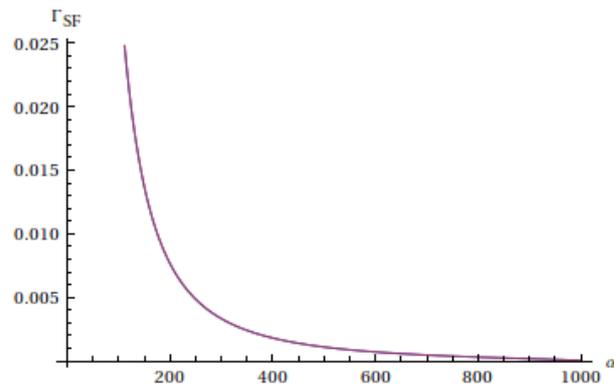


Abbildung 5.8: Dargestellt ist  $\Gamma_{SF}$  (blau) und  $\Gamma_{SF}^1$  (rot) gegen  $\alpha$  für  $\theta = \frac{\pi}{3}$ ,  $V = 100$ ,  $E = 100$ . Sie liegen für große  $\alpha$  nahezu übereinander.

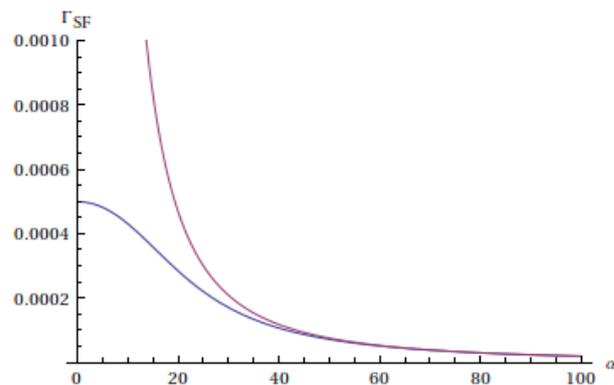


Abbildung 5.9: Man erkennt deutlich die Abweichung der asymptotischen Lösung (rot) von der exakten Spinfliprate (blau) für  $\theta = \frac{\pi}{3}$ ,  $V = 1$ ,  $E = 1000$ .

Für die Entwicklung der Koeffizienten  $\vec{a}$  der gestreuten Wellenfunktion entwickelt man zunächst  $\vec{b}$  und  $M$  in erster Ordnung in  $R$  um  $\infty$  und erhält schließlich nach einsetzen in die Formel für die Spinfliprate, wenn man nur den konstanten Term für  $R=1$  angibt.

$$\Gamma_{SF}^2 = \frac{V^2}{2E + V^2} \quad (5.3.4)$$

in skalierten Einheiten.

### 5.3.3 Übergang der Näherungen

Es stellt sich die Frage, wann die beiden asymptotischen Lösungen der Spinfliprate in einander übergehen. Dazu sucht man den Schnittpunkt der beiden Näherungen

$$\begin{aligned} \frac{V^2}{2E + V^2} &= \frac{V^2(2E + V^2)\sqrt{E - \alpha}\sqrt{E + \alpha}}{2\alpha^2(4E^2 + 4EV^2 + V^4 - 4\alpha^2)} \sin^2 \theta \\ &\approx \frac{V^2(2E + V^2)E}{2\alpha^2(2E + V^2)^2} \sin^2 \theta. \end{aligned}$$

Für ein kleines  $\alpha$  ergibt sich

$$\begin{aligned} V^2 &= \frac{V^2 E}{2\alpha^2} \sin^2 \theta \\ \Rightarrow \alpha &= \sqrt{\frac{E}{2}} \sin \theta. \end{aligned} \quad (5.3.5)$$

### 5.3.4 Reskalierung der Ergebnisse

Zunächst werden die Ergebnisse mit

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{m|\mu_B|}{\hbar^2} R^2 B_0 \\ E &= \frac{m}{\hbar^2} R^2 E_0 \\ V &= \frac{m}{\hbar^2} V_0 R \end{aligned}$$

in die Größen des Ausgangssystems übersetzt, wobei  $R = (\nabla\varphi)^{-1}$ .

Damit ergibt sich für die Näherungsfunktionen (5.3.2) und (5.3.4) für fest vorgegebenes  $E_0$ ,  $V_0$  und  $R \rightarrow \infty$ .

$$\begin{aligned} \Gamma_{SF}^1 &= \frac{V_0^2(2E_0 + \frac{m}{\hbar^2}V_0^2)\sqrt{E_0 - |\mu_B|B_0}\sqrt{E_0 + |\mu_B|B_0} \sin^2 \theta}{|\mu_B|^2 B_0^2(4E_0^2 + 4\frac{m}{\hbar^2}E_0 + \frac{m^2}{\hbar^4}V_0^4 + |\mu_B|^2 B_0^2)} (\nabla\varphi)^2 \\ \Gamma_{SF}^2 &= \frac{\frac{m}{\hbar^2}V_0^2}{2E_0 + \frac{m}{\hbar^2}V_0^2} \end{aligned}$$

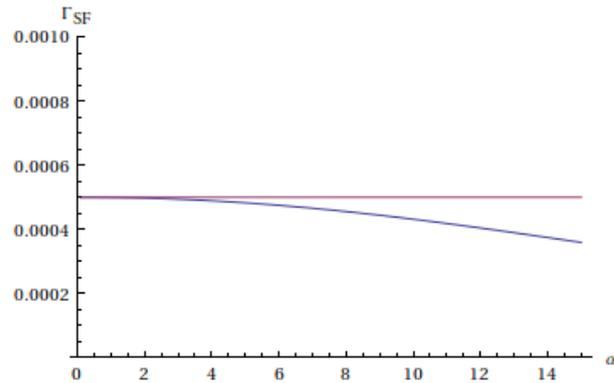


Abbildung 5.10: Dargestellt ist  $\Gamma_{SF}$  (blau) und  $\Gamma_{SP}^2$  (rot) gegen  $\alpha$  für  $\theta=\frac{\pi}{3}$ ,  $V=1$ ,  $E=1000$ .

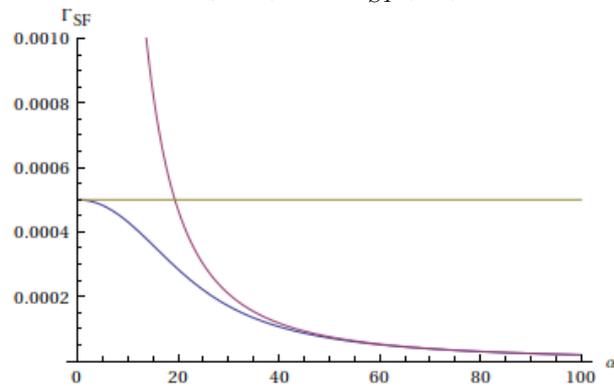


Abbildung 5.11: Dargestellt ist  $\Gamma_{SF}$  (blau),  $\Gamma_{SP}^1$  (rot) und  $\Gamma_{SF}^2$  (gelb) gegen  $\alpha$  für  $\theta=\frac{\pi}{3}$ ,  $V=1$ ,  $E=1000$ .

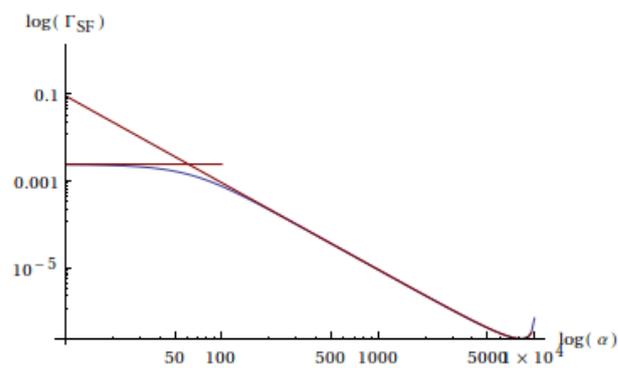


Abbildung 5.12: Dargestellt ist die  $\log(\Gamma_{SF})$  (blau),  $\log(\Gamma_{SP}^1)$  (rot) und  $\log(\Gamma_{SF}^2)$  (rot) gegen  $\log(\alpha)$  für  $\theta=\frac{\pi}{3}$ ,  $V=7$ ,  $E=100^2$ .

$\Gamma_{SF}^2$  stimmt mit dem Reflexionskoeffizienten eines spinlosen Teilchens in einer Dimension überein.

$\Gamma_{SF}^2$  ist völlig unabhängig vom Winkel  $\theta$ . Zu erwarten ist jedoch, dass für  $\theta = 0$  und  $\theta = \frac{\pi}{2}$  die Spinfliprate 0 wird, weil eine ferromagnetische Struktur vorliegt. Dennoch stellt die Formel keinen Widerspruch zu den Erwartungen dar, denn die Fälle für Winkel um 0 und  $\frac{\pi}{2}$  liegen außerhalb ihres Gültigkeitsbereichs.

Als Schnittpunkt in den Einheiten des ursprünglichen Systems gilt

$$|\mu_B|B_0 = \sqrt{E_0 \frac{\hbar^2 (\nabla \varphi)^2}{2m}} \sin \theta.$$

Mit diesen Ergebnissen lässt sich die Spinfliprate für die Größen des Ausgangssystems berechnen.



## 6 Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick

In dieser Bachelorarbeit wurde ein Elektron betrachtet, das sich durch ein Magnetfeld bewegt.

Die Berry-Phase, die ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen erhält, wenn das umgebende Magnetfeld adiabatisch um eine Periode variiert wird, wurde berechnet. Damit konnte gezeigt werden, dass die eingeschlossene Fläche im Parameterraum mit der doppelten Berry-Phase übereinstimmt. Unter Verwendung dieses Ergebnisses wurde gezeigt, dass sich das System Magnetfeld-Teilchen für große Radien der Kreisbahn adiabatisch verhält, also keine Übergänge zwischen Energieniveaus stattfinden. Dies ist darauf zurückzuführen, dass sich das Magnetfeld für beliebig großes  $R$  einer ferromagnetischen Struktur annähert.

Obiges Modell wurde durch Einführung eines Streupotenzials, das einer Störstelle im Skyrminionengitter entspricht, erweitert und damit die Spinfliprate eines Teilchens berechnet, das mit Spin parallel zum Magnetfeld, auf die Störstelle trifft. Der Einfachheit halber wurde die exakte Formel für die Spinfliprate nicht angegeben, sondern nur Näherungen für die zwei Bereiche berechnet, wobei  $V_0$  und  $E_0$  fest vorgegeben und  $R \rightarrow \infty$

1.  $B_0$  fest

$$2. \frac{\hbar^2(\nabla\varphi)^2}{2m} \ll |\mu_B|B_0 \ll \sqrt{E_0 \frac{\hbar^2(\nabla\varphi)^2}{2m}}$$

Es bietet sich also an noch weitere Bereiche zu suchen, in denen sich die Spinfliprate asymptotisch nähern lässt. In dem System gibt es verschiedene Ausdrücke für Energien, die unterschiedlich mit  $R$  skalieren, nämlich

$$\frac{\hbar^2(\nabla\varphi)^2}{2m} \propto R^{-2}$$

$$\sqrt{E_0 \frac{\hbar^2(\nabla\varphi)^2}{2m}} \propto R^{-1}$$

sowie  $E_0$ . Je nachdem wie man die Abhängigkeit von  $R$  bei  $|B_0|$  wählt, lassen sich noch unterschiedliche Bereiche asymptotisch nähern, z.B.

$$|\mu_B|B_0 \approx \sqrt{E_0 \frac{\hbar^2(\nabla\varphi)^2}{2m}}$$

und damit im skalierten System

$$\alpha \approx \sqrt{E}$$

wobei  $B_0 \propto R^{-1}$ .



# Literaturverzeichnis

- [1] S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfeiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, P. Böni, "Skyrmion Lattice in a Chiral Magnet", Science VOL 323, 13.02.2009
- [2] C. Pfeiderer, "Magnetismus mit Drehsinn", Physik Journal 9 (2010) Nr. 11
- [3] F. Jonietz, S. Mühlbauer, C. Pfeiderer, A. Neubauer, W. Münzer, A. Bauer, T. Adams, R. Georgii, P. Böni, R.A. Duine, K. Everschor, M. Garst, A. Rosch, "Spin Transfer Torques in MnSi at Ultralow Current Densities", Science VOL 330, 17.10.2010
- [4] A. Bohm, A. Mostafazadeh, H. Koizumi, Q. Niu, J. Zwanziger, "The Geometric Phase in Quantum Systems", Springer 2003
- [5] D. Suter, "Quantenmechanische Paradoxa", WS98/99 Universität Dortmund
- [6] W. Dittrich, M. Reuter, "Classical and Quantum Dynamics", Springer 2001
- [7] A. Shnirman, "Geometric phases and spin-orbit effects", KIT Karlsruhe
- [8] P. Wenk, "Geometrische Phasen in der Physik (Teil I), Universität Hamburg 22.08.2004
- [9] Barry Simon, "Holonomy, the Quantum Adiabatic Theorem, and Berry's Phase", Physical Review Letters, Volume 51, Number 24
- [10] W. Kühnel, "Differentialgeometrie", Vieweg 2005
- [11] D. Chruscinski, A. Jamiolkowski, "Geometric Phases in Classical and Quantum Mechanics", Birkhäuser Boston 2004
- [12] Josef W. Zwanziger, Marianne Koenig, Alexander Pines, "Berry's Phase", Annu. Rev. Phys. Chem. 1990 41:601-46
- [13] Ming-Che Chang, "Berry phase in solid state physics" 2006
- [14] W. Greiner, "Quantenmechanik Einführung", Verlag Harri Deutsch, 6. Auflage 2005, Frankfurt am Main



# Danksagung

Hiermit möchte ich mich sehr herzlich bei Prof. Dr. Achim Rosch für die sehr gute Betreuung bei dieser Bachelorarbeit bedanken.

Weiterer Dank geht besonders an Karin Everschor, die immer Zeit für mich hatte und mir hilfreiche Anregungen zur Thematik gegeben hat.

Vielen Dank an Matthias Sitte, der mir bei Computerfragen geholfen hat.

Dank geht natürlich auch an die Arbeitsgruppen von Prof. Dr Achim Rosch und PD Ralf Bulla, bei denen ich mich sehr wohl gefühlt habe.

Weiterer Dank geht an alle, die mir Nahe stehen und mir während dieser Zeit sehr viel Verständnis entgegengebracht haben.



# Eigenständigkeitserklärung

”Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.”

Köln, den 12.10.2011

---

(Mascha Fiona Baedorf)