

Bachelorarbeit

Geometrische Phasen in exchange-only Qubits

vorgelegt von

PHILIP SIMON SCHLÖSSER

an der

Universität Konstanz,
Fachbereich Physik

Gutachter:

PROF. DR. GUIDO BURKARD
Konstanz, 2019

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird das Phänomen der Berry-Phase in mathematisch rigoroser Weise beschrieben, hergeleitet und bewiesen. Die dabei erhaltenen Ausdrücke werden verwendet um herauszufinden, ob es möglich ist, Quantengatter bei (leicht modifizierten) exchange-only Qubits als Berry-Phasen zu erhalten.

Dabei stellt sich heraus, dass allein mit Austauschwechselwirkung nur triviale Berry-Phasen zustande kommen. Wird jedoch ein homogenes Magnetfeld mit variabler Richtung hinzugenommen, so kann durch Variation der Richtung des Magnetfelds tatsächlich ein Phasengatter als Berry-Phase realisiert werden. Im Anschluss wird (störungstheoretisch) der Fall eines inhomogenen Magnetfeld konstanter Richtung betrachtet. Hierbei ergeben sich bei den beiden verwendeten Näherungsmethoden verschiedene Ergebnisse. In jedem Fall ist es jedoch nicht möglich, ein Gatter zu realisieren, wenn das Magnetfeld konstant gehalten wird.

Schließlich wird noch auf fehlgeschlagene (bzw. ergebnislose) Rechnungen eingegangen, die unter Anderem zum Ziel hatten, 2-Qubit-Gatter zu realisieren oder Phasengatter ohne die Variation makroskopischer Größen zu realisieren.

Inhaltsverzeichnis

1	Mathematische Grundbegriffe	2
1.1	Vektorbündel	2
1.2	Zusammenhänge	4
1.3	Konstruktion des Berry-Zusammenhangs	11
1.4	Zwei Sonderfälle für $d = 1$	20
1.5	Sonderfälle für $d > 1$	22
2	Exchange-only Qubits	23
3	Nicht-entarteter Fall — Nur Austausch	24
3.1	Beschreibung des Hamiltonoperators	24
3.2	Diagonalisierung des Hamiltonoperators	25
3.3	Bestimmung der Berry-Phase für alle Wege	27
4	Entarteter Fall — Homogenes Magnetfeld	27
4.1	Beschreibung des Hamiltonoperators	28
4.2	Finden der Parametervariationsmöglichkeit Ω	28
4.3	Definition der richtigen Karten auf Ω	29
4.4	Beschreibung der Karte (Ω_2, ϕ_2)	31
4.5	Bestimmung der Holonomiegruppe in der Karte (Ω_2, ϕ_2)	32
4.6	Beschreibung der Karte (Ω_1, ϕ_1)	33
4.7	Transfer der Holonomiegruppe auf Qubit-Zustände	33
5	Entarteter Fall — Inhomogenes Magnetfeld	36
5.1	Störungstheorie	36
5.2	Schrieffer-Wolff-Transformation	38
6	Fazit und Ausblick	41
6.1	Fazit	41
6.2	Methoden und Limitationen	41
6.3	Ausblick	42
6.3.1	Mehr-Qubit-Gatter	42
6.3.2	Machbarere Realisierung von 1-Qubit-Gattern	43
6.3.3	Andere Ansätze	43
	Anhang	45
A	Grundbegriffe der Differentialgeometrie	45
B	Etwas Differentialtopologie	51

Einleitung

In den Einführungsvorlesungen zur Quantenmechanik wurden fast ausschließlich zeitunabhängige Hamiltonoperatoren untersucht. Wagen wir jedoch den Schritt in die Quantenmechanik mit zeitabhängigen Hamiltonoperatoren, so fällt auf, dass die Zeitabhängigkeit meist auf einen Parameter zurückzuführen ist, der sich ändert. Es ist also meist gleichwertig, einen parameterabhängigen Hamiltonoperator $H(\lambda)$ zu betrachten, dessen Parameter λ sich mit der Zeit ändert.

Eine Vorstufe der vollen Zeitabhängigkeit ist dabei, wenn sich der Parameter nur sehr langsam ändert (aufgrund der sehr kleinen Zeitskala der Quantenmechanik fällt z.B. jede manuelle Parameteränderung darunter). Zu jedem Zeitpunkt wirkt es dann so, als sei der Parameter konstant. Aus Stetigkeitsgründen ist es daher nicht weiter verwunderlich, dass bei dieser „sanften“ Zeitabhängigkeit ein Eigenzustand immer im „selben“ Eigenzustand verbleibt (das ist die Aussage des adiabatischen Theorems).

Konkret bedeutet dies: Ist $\varepsilon(\lambda)$ ein (glatt parameterabhängiger) Eigenwert von $H(\lambda)$ mit konstanter Vielfachheit 1, und verändert sich λ hinreichend langsam, so bleibt ein System, das sich anfangs im Eigenraum $\text{Eig}(H(\lambda_0), \varepsilon(\lambda_0))$ befindet, immer im Eigenraum $\text{Eig}(H(\lambda), \varepsilon(\lambda))$.

Allein durch diese Tatsache ist die Zeitentwicklung allerdings noch nicht vollständig beschrieben, denn innerhalb des Eigenraums kann der (normierte) Zustandsvektor beliebig mit $U(1)$ transformiert werden. Das hat insbesondere zur Folge, dass nach Abfahren eines geschlossenen Weges im Parameterraum der Endzustand zwar im selben Eigenraum ist wie der Ausgangszustand, sich diese beiden Zustände also nur um einen komplexen Phasenfaktor unterscheiden, jedoch a priori völlig unklar ist, wie dieser Phasenfaktor aussieht.

Naiv könnte man erst einmal davon ausgehen, dass dieser Phasenfaktor einfach nur die dynamische Phase

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} \varepsilon(\lambda(t)) dt\right) \quad (0.1)$$

ist. Diese kann ähnlich wie der Phasenfaktor $\exp(-\frac{i\varepsilon t}{\hbar})$ beim Übergang von der zeitabhängigen zur zeitunabhängigen Schrödingergleichung begründet werden: Das System hatte eine bestimmte Zeit lang die Energie $\varepsilon(\lambda)$. Diese Phase lässt sich rechnerisch einfach dadurch abschalten, dass wir statt $H(\lambda)$ den Operator $H(\lambda) - \varepsilon(\lambda)$ betrachten.

Es stellt sich jedoch heraus, dass eine Beschreibung allein mit der dynamischen Phase die Realität nicht ganz trifft. Darüber hinaus liefert uns diese Beschreibung keinerlei Anhaltspunkt dafür, welcher Zustand zwischendurch angenommen wird, da ja jede Wahl eines (glatt parameterabhängigen) Eigenzustands $\eta(\lambda) \in \text{Eig}(H(\lambda), \varepsilon(\lambda))$ mit einer beliebigen Funktion $\exp(i\chi(\lambda))$ ($\chi(\lambda) \in \mathbb{R}$) „umgeiecht“ werden kann. Bei anderer Wahl des „Referenzpunkts“ $\eta(\lambda)$ muss sich daher auch in jedem Ort λ der Phasenfaktor ändern. Der Phasenunterschied nach Durchlaufen einer geschlossenen Kurve ist das Wegintegral dieser Änderungen, die verbleibende, nicht-dynamische Phase ist also rein geometrischer

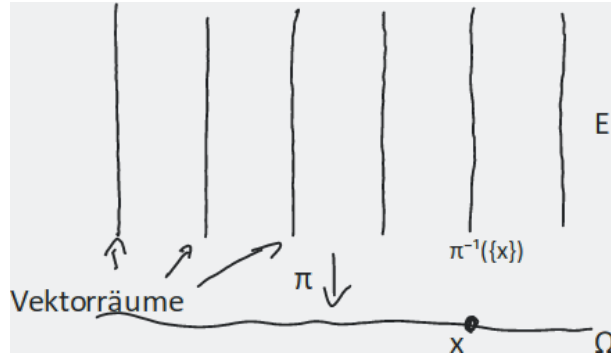


Abbildung 1: Veranschaulichung der Grundidee des Vektorbündels $\pi : E \rightarrow \Omega$.

Natur. Sie wird daher auch als *geometrische Phase* oder (nach ihrem Entdecker) *Berry-Phase* bezeichnet.

Wie man sie gut mathematisch beschreiben kann und insbesondere der Zusammenhang zum Umeichen der Basis des Eigenraums wird in dieser Arbeit ausführlich dargelegt, ebenso wie die Verallgemeinerung auf andere Vielfachheiten von ε . Das dadurch erlangte Wissen wird im Anschluss auf den Versuch verwandt, beim (mehr oder minder) konkreten quantenmechanischen System des exchange-only Qubits Quantengatter als geometrische Phase zu realisieren.

1 Mathematische Grundbegriffe

Bevor wir zu der Frage kommen, wie genau sich die geometrische Phase als Holonomie eines bestimmten Zusammenhangs eines komplexen Vektorbündels über der Parametervarietät auffassen lässt, ist es notwendig, etwas mathematische Maschinerie einzuführen, und insbesondere diese Begriffe zu erklären. Noch fundamentalere Begrifflichkeiten, die auch gelegentlich verwendet werden, werden in Anhang A angesprochen.

1.1 Vektorbündel

Für die Beschreibung der geometrischen Phase ist es vorteilhaft, den Parameterraum in den Kreis der betrachteten Objekte aufzunehmen. Es wird sich als nützlich herausstellen, einen Zustand als „Zusatzinformation“ zu betrachten, die fest mit einem bestimmten Punkt im Parameterraum assoziiert ist.

Eine Möglichkeit, eine Menge F von Zusatzinformationen an den Parameterraum Ω heranzuheften, ist, das kartesische Produkt $F \times \Omega$ zu betrachten. Falls sich aber die Zusatzinformationen in jedem Punkt unterscheiden, ist dies keine sinnvolle Option.

Besser wäre es, eine Struktur zu finden, die nur *lokal* aussieht wie $F \times \Omega$.

Diese Idee ist in Abbildung 1 veranschaulicht. Dort sehen wir, wie mithilfe der Abbildung $\pi : E \rightarrow \Omega$ mit jedem Punkt $x \in \Omega$ der Grundmenge der

Vektorraum $\pi^{-1}(\{x\})$ assoziiert wird. Da im Allgemeinen gefordert wird, dass π differenzierbar ist, geschieht dies auf differenzierbare (insbesondere stetige) Weise.

Da überdies der Parameterraum zunächst nur eine offene Teilmenge Ω von \mathbb{R}^n ist, ist es nicht nötig, den Formalismus der Mannigfaltigkeit in voller Breite einzuführen.

1.1.1 Definition: Sei E eine Mannigfaltigkeit und $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ offen.

1. Eine surjektive, beliebig oft differenzierbare Abbildung $\pi : E \rightarrow \Omega$ heißt *Bündel* (oft wird auch E als Bündel und π als *Bündelprojektion* bezeichnet). Die Menge Ω wird dann als *Basis* oder *Grundmenge* bezeichnet, und für $x \in \Omega$ heißt $\pi^{-1}(\{x\})$ die *Faser* über x .
2. Ein Bündel $\pi : E \rightarrow \Omega$ heißt *F-Faserbündel*, falls zu jedem Punkt $x \in \Omega$ eine offene Menge U mit $x \in U \subseteq \Omega$ und ein Homöomorphismus $\phi : \pi^{-1}(U) \rightarrow F \times U$ existiert, also das Bündel lokal aussieht wie $F \times U$. Ein derartiges Tupel (U, ϕ) nennt man auch *lokale Trivialisierung*.
3. Ist F dabei der Vektorraum \mathbb{R}^d oder \mathbb{C}^d , so heißt π (reelles oder komplexes) *Vektorbündel*. Eine lokale Trivialisierung eines Vektorbündels bewahrt zusätzlich die Vektorraumstruktur der Fasern, ist also eine lineare Abbildung.
4. Ist $U \subseteq \Omega$ offen und $s : U \rightarrow E$ eine glatte Funktion mit $\pi \circ s = \text{id}_U$, so heißt s (*lokaler*) *Schnitt* des Bündels π . Mit anderen Worten bedeutet dies, dass für jeden Punkt $x \in U$ der Grundmenge das Objekt $s(x)$ in der Faser über x liegt. Die Menge aller lokalen Schnitte von π , die auf U definiert sind, heißt $\Gamma(\pi, U)$. (Ist $U = \Omega$, so wird das U weggelassen.)

1.1.2 Bemerkung: 1. Im Gegensatz zum Produkt $F \times \Omega$ erlaubt die Definition des Vektorbündels, dass sich der Vektorraum, wenn man in der Grundmenge einen geschlossenen Weg abfährt, um die Grundmenge „herumwindet“.

2. Durch punktweise Addition und Skalierung hat $\Gamma(\pi, U)$ für ein reelles Vektorbündel π die Struktur eines \mathbb{R} -Vektorraums. Vermöge $(fs)(x) := f(x)s(x)$ ($f \in C^\infty(U)$, $s \in \Gamma(\pi, U)$) hat $\Gamma(\pi, U)$ sogar die Struktur eines $C^\infty(U)$ -Moduls.
3. Analog lässt sich eine \mathbb{C} -Vektorraum- bzw. $C^\infty(U, \mathbb{C})$ -Modulstruktur für die lokalen Schnitte $\Gamma(\pi, U)$ eines komplexen Vektorbündels π definieren.

1.1.3 Beispiel: Natürlich ist $F \times \Omega$, ausgestattet mit der Projektion auf die zweite Komponente, ebenfalls ein Vektorbündel (falls $F = \mathbb{R}^d$ oder \mathbb{C}^d). Jedoch macht folgendes Beispiel im Laufe dieses Kapitels deutlich, aus welchem Grund der Begriff des Bündels nötig ist.

Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ offen, sei $H : \Omega \rightarrow \mathbb{C}^{m \times m}$ ein (glatt) parameterabhängiger Hamiltonoperator mit (glattem) Eigenwert $\varepsilon : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, der immer die Vielfachheit d

hat. Das bedeutet $H(\lambda)$ ist immer selbstadjungiert und $\dim \text{Ker}(H(\lambda) - \varepsilon(\lambda)) = d$ für alle λ . Dann ist der Eigenraum

$$E_\lambda := \text{Eig}(H(\lambda), \varepsilon(\lambda)) \quad (1.1)$$

von $H(\lambda)$ zum Eigenwert $\varepsilon(\lambda)$ für alle λ isomorph zu \mathbb{C}^d . Aus den E_λ konstruieren wir nun das Vektorbündel, das später noch relevant sein wird: Wir definieren

$$E := \bigcup_{\lambda \in \Omega} E_\lambda \times \{\lambda\} \quad (1.2)$$

und $\pi : E \rightarrow \Omega$ die Projektion auf die zweite Komponente. E ist offenbar eine Teilmenge von $\mathbb{C}^m \times \Omega$, also können wir hier von Glattheit sprechen. Ferner ist die Faser über λ der Vektorraum E_λ , der zu \mathbb{C}^d isomorph ist. Da der Hamiltonoperator glatt von den Parametern abhängt, tun das auch seine Eigenvektoren; folglich ist E eine glatte Mannigfaltigkeit und π ein Vektorbündel. Wie wir später sehen werden, ist es im Allgemeinen nicht möglich, E auf $\mathbb{C}^d \times \Omega$ zu transformieren, also E zu trivialisieren.

1.2 Zusammenhänge

Wir beschäftigen uns nun mit der Frage, was unter der Ableitung eines Vektorbündels zu verstehen ist. Die Forderung der Differenzierbarkeit ist zwar Teil der Definition 1.1.1 (4.) von Schnitten von Vektorbündel, jedoch ist für das tatsächliche Ableiten etwas mehr Struktur erforderlich.

Während es gar kein Problem ist, für ein Skalarfeld $f \in C^\infty(\Omega)$ den Differenzialquotienten

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x + te_i) - f(x)}{t} \quad (1.3)$$

auszuwerten, um die Ableitung in x in Richtung des i -ten Einheitsvektors e_i zu erhalten, wirft ein analoger Ausdruck für einen Schnitt s eines Vektorbündels wesentlich größere Fragen auf, denn $s(x + te_i)$ und $s(x)$ sind Elemente von völlig verschiedenen Vektorräumen (nämlich von $\pi^{-1}(\{x + te_i\})$ und $\pi^{-1}(\{x\})$) und können nicht voneinander subtrahiert werden.

Abhilfe verschafft hier das Konzept eines parallelen Transports, einer einheitlichen Methode, den Vektor $s(x + te_i)$ von der Faser $\pi^{-1}(\{x + te_i\})$ in die Faser $\pi^{-1}(\{x\})$ entlang eines Wegs „parallel“ zu transportieren. Für kleiner werdende t verschwindet hierbei auch die Abhängigkeit von diesem Weg.

A priori gibt es viele Arten, wie ein solcher Transport ablaufen kann, d.h. es ist eine weitere Struktur vonnöten: die des Zusammenhangs.

1.2.1 Definition: Sei $\pi : E \rightarrow \Omega$ ein (reelles oder komplexes) Vektorbündel, wobei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ offen.

1. Eine Familie (\mathbb{R} - oder \mathbb{C} -)linearer Abbildungen $\nabla_i : \Gamma(\pi) \rightarrow \Gamma(\pi)$ ($1 \leq i \leq n$) heißt (reeller oder komplexer) *Zusammenhang* oder auch *kovariante Ableitung*, falls sie einer modifizierten Form der Leibnizregel genügt:

$$\forall f \in C^\infty(\Omega) : \forall s \in \Gamma(\pi) : \nabla_i(fs) = (\partial_i f)s + f\nabla_i s, \quad (1.4)$$

wobei ∂_i die normale partielle Ableitung skalarer Funktionen ist. Für komplexe Zusammenhänge folgt aus der \mathbb{C} -Linearität und der Leibnizregel für reelle Funktionen automatisch die Leibnizregel für komplexe Funktionen.

2. Sei $\gamma : (0, 1) \rightarrow \Omega$ ein Weg. Ein Schnitt $s \in \Gamma(\pi)$ heißt *parallel* entlang γ , falls

$$\forall t \in (0, 1) : \sum_{i=1}^n \dot{\gamma}(t)^i \nabla_i s(\gamma(t)) = 0, \quad (1.5)$$

also falls in jedem Punkt auf dem Weg γ die ∇ -Richtungsableitung von s entlang dem Richtungsvektor von γ gleich 0 ist.

In diesem Falle heißt auch die Kurve $\tilde{\gamma} : (0, 1) \rightarrow E, t \mapsto s(\gamma(t))$ *parallel*.

1.2.2 Lemma: Sei $\gamma : (0, 1) \rightarrow \Omega$ ein glatter Weg, $t \in (0, 1)$ und $e \in \pi^{-1}(\{\gamma(t)\})$. Es existiert stets eine eindeutige parallele Kurve $\tilde{\gamma} : (0, 1) \rightarrow E$ mit $\pi \circ \tilde{\gamma} = \gamma$ und mit $\tilde{\gamma}(t) = e$.

Diese Kurve ist linear in e und man schreibt $\tilde{\gamma}(s) = \Gamma(\gamma)_t^s e$. Die lineare Abbildung $\Gamma(\gamma)_t^s$ heißt *paralleler Transport* von $\gamma(s)$ bis $\gamma(t)$ entlang γ .

Beweis. Unter Zuhilfenahme von Karten lässt sich diese Aussage als lineares Anfangswertproblem schreiben. Die Existenz und Eindeutigkeit der Lösungen folgt dann aus dem Satz von Picard-Lindelöf. Die lineare Abhängigkeit vom Anfangsvektor e folgt aus der Linearität der Differenzialgleichung. \square

1.2.3 Bemerkung: Auf allgemeinen Mannigfaltigkeiten ist ein Zusammenhang eine (\mathbb{R} - oder \mathbb{C} -)lineare Abbildung $\nabla : \Gamma(\pi) \rightarrow \Lambda^1(M) \otimes \Gamma(\pi)$ (wobei das Tensorprodukt $C^\infty(M)$ -bilinear oder $C^\infty(M, \mathbb{C})$ -bilinear ist), welche die Regel

$$\nabla_X(fs) = f\nabla_X s + X(f)s \quad (1.6)$$

erfüllt ($f \in C^\infty(M), s \in \Gamma(\pi), X \in \Gamma(TM)$). Da in der hier verwendeten Mannigfaltigkeit Ω alle Vektorfelder die Form

$$X = \sum_{i=1}^n a^i \partial_i \quad (1.7)$$

haben ($a^1, \dots, a^n \in C^\infty(M)$), lässt sich $\nabla_X s$ stets als

$$\sum_{i=1}^n a^i \nabla_{\partial_i} s =: \sum_{i=1}^n a^i \nabla_i s \quad (1.8)$$

schreiben.

Im Folgenden seien alle Vektorbündel und alle Zusammenhänge komplex.

1.2.4 Beispiel: 1. Sei $\pi : E \rightarrow \Omega$ ein Vektorbündel und sei $\lambda \in \Omega$. Eine lokale Trivialisierung (U, ϕ) mit $\lambda \in U$ definiert einen Zusammenhang auf $\pi^{-1}(U)$ durch

$$\nabla_i \phi(\lambda) := \phi^{-1} \left(\lim_{t \rightarrow 0} \frac{\phi(s(\lambda + te_i))_1 - \phi(s(\lambda))_1}{t}, \lambda \right), \quad (1.9)$$

indem alle Kurven der Form $t \mapsto \phi^{-1}(v, \gamma(t))$ ($v \in \mathbb{C}^d$ konstant, γ Weg in U) als parallel angenommen werden. Wählt man $(\phi^{-1}(e_i, \lambda))_i$ als lokale Basis, so entspricht ∇_i der i -ten partiellen Ableitung der Koeffizienten bezüglich dieser Basis.

2. Ist $\pi : E \rightarrow \Omega$ ein Vektorbündel, $(\nabla_i)_i$ ein Zusammenhang, und sind $\nabla_i : \Gamma(\pi) \rightarrow \Gamma(\pi)$ (lies: *Daleth*) $C^\infty(\Omega, \mathbb{C})$ -lineare Abbildungen, so ist $(\nabla'_i)_i$, definiert durch

$$\nabla'_i s(\lambda) := \nabla_i s(\lambda) + \nabla_i s(\lambda) \quad (1.10)$$

ebenfalls ein Zusammenhang. Umgekehrt kann man zeigen, dass sich zwei Zusammenhänge stets um eine solche Funktionenschar unterscheiden.

1.2.5 Satz/Definition: Sei $\pi : E \rightarrow \Omega$ ein Vektorbündel, (U, ϕ) eine lokale Trivialisierung von π , $(\nabla'_i)_i$ der durch ϕ erzeugte Zusammenhang (vgl. Beispiel 1.2.4) und $(\nabla_i)_i$ ein (anderer) Zusammenhang von π .

Die Abbildungen $\nabla_i : \Gamma(\pi) \rightarrow \Gamma(\pi)$, definiert durch $\nabla_i := \nabla_i - \nabla'_i$, sind $C^\infty(\Omega, \mathbb{C})$ -linear. Mittels der Trivialisierung ϕ lassen sie sich als matrixwertige Funktionen

$$A_i(\lambda)v := \phi(\nabla_i(\phi^{-1}(v, \cdot))(\lambda))_1 \quad (v \in \mathbb{C}^d) \quad (1.11)$$

darstellen. Diese A_i lassen sich nun zu einer matrixwertigen Differenzialform

$$A := \sum_{i=1}^n A_i dx_i \quad (1.12)$$

zusammenfassen. Diese Differenzialform verhält sich bzgl. Koordinatentransformation (der Parameter) wie eine 1-Form und heißt die *Zusammenhangsform* von $(\nabla_i)_i$ bzgl. der Trivialisierung (U, ϕ) . Die A_i heißen dementsprechend *Komponenten der Zusammenhangsform*.

Beweis. Für die $C^\infty(\Omega, \mathbb{C})$ -Linearität folgt die Additivität bereits aus der \mathbb{C} -Linearität. Es sind also nur noch die richtigen Skalierungseigenschaften zu zeigen. Sei dazu $s \in \Gamma(\pi)$, $f \in C^\infty(\Omega, \mathbb{C})$, dann ist

$$(\nabla_i - \nabla'_i)(fs) = (\partial_i f)s + f\nabla_i s - (\partial_i f)s - f\nabla'_i s = f(\nabla_i - \nabla'_i)s. \quad (1.13)$$

Somit handelt es sich um $C^\infty(\Omega, \mathbb{C})$ -lineare Abbildungen, die sich mit der durch ϕ erzeugten Basis als matrixwertige Funktionenschar A_i schreiben lassen.

Dass die A_i sich bei Koordinatentransformation (der Parameter) wie die Komponenten einer Differenzialform verhalten, ist darauf zurückzuführen, dass sich die ∇_i, ∇'_i so verhalten. \square

1.2.6 Bemerkung: Mit dem letzten Satz sehen wir, dass bei Fixierung einer Trivialisierung ϕ jeder Zusammenhang in die Form aus Beispiel 1.2.4 (2.) gebracht werden kann, sodass jeder Zusammenhang bei Wahl einer Trivialisierung durch eine Familie von Matrixfeldern beschrieben werden kann.

Bei Wechsel der Trivialisierung weist jedes dieser Matrixfelder ein ganz besonderes Transformationsverhalten auf. Wird nämlich die Basis mit der Matrix $g(\lambda)$ transformiert, so transformiert sich A_i durch $A'_i = gA_i g^{-1} - (\partial_i g)g^{-1}$.

Auf die physikalische Interpretation dieses Transformationsverhaltens wird in Beispiel 1.2.10 noch eingegangen werden.

1.2.7 Definition: Sei $\pi : E \rightarrow \Omega$ ein Vektorbündel und $(\nabla_i)_i$ ein Zusammenhang auf π . Das Objekt

$$R_{ij} : \Omega \rightarrow \mathbb{C}^{d \times d}, x \mapsto \partial_i A_j(x) - \partial_j A_i(x) + [A_i(x), A_j(x)] \quad (1.14)$$

$((A_i)_i$ ist die Zusammenhangsform von $(\nabla_i)_i$ bzgl. einer Trivialisierung (U, ϕ) heißt *Krümmungsform* des Zusammenhangs $(\nabla_i)_i$.

Mittels der Trivialisierung kann jedes R_{ij} ähnlich zu Definition 1.2.5 als $C^\infty(U, \mathbb{C})$ -lineare Abbildung $\Gamma(\pi, U) \rightarrow \Gamma(\pi, U)$ aufgefasst werden. Diese $C^\infty(U, \mathbb{C})$ -lineare Abbildung ist von der Trivialisierung unabhängig und kann daher von einer eventuell kleineren Menge U auf den ganzen Parameterraum Ω erweitert werden.

1.2.8 Bemerkung: Im allgemeineren differenzialgeometrischen Kontext definiert man zur Zusammenhangsform A die Krümmungsform R durch

$$R := dA + [A \wedge A], \quad \text{dh.} \quad R(X, Y) = dA(X, Y) + A(X)A(Y) - A(Y)A(X). \quad (1.15)$$

Mit der obigen Definition lässt sich dies via

$$R = R_{ij} dx_i \wedge dx_j \quad (1.16)$$

vereinbaren.

1.2.9 Beispiel: 1. Ein in der Geometrie (und der klassischen Physik) sehr häufig auftretender Zusammenhang ist der Levi-Civita-Zusammenhang.

Sei dazu M eine Mannigfaltigkeit mit Metrik $g : M \rightarrow \bigcup_{x \in M} L(T_x M, \Lambda_x^1 M)$. Dass g eine Metrik ist, bedeutet, dass für alle $x \in M$ $g(x)$ ein Skalarprodukt auf dem Tangentialraum $T_x M$ ist. Ebenso kann g auch analog zu Anhang A als bilineare Abbildung $\Gamma(\pi) \times \Gamma(\pi) \rightarrow C^\infty(M)$ aufgefasst werden, wobei $\pi : TM \rightarrow M$ die Projektion des Tangentialbündels ist.

Zu g gibt es nun einen eindeutigen Zusammenhang ∇ , welcher mit der Metrik g verträglich ist:

$$X(g(Y, Z)) = g(\nabla_X Y, Z) + g(Y, \nabla_X Z)$$

für alle $X, Y, Z \in \Gamma(\pi)$, und der torsionsfrei ist.

Um die letzte Forderung zu erklären, betrachten wir die Zusammenhangsform A von ∇ bzgl. einer Karte ϕ , die $(X_i)_i$ erzeugt. Sie lässt sich so ausdrücken, dass

$$\nabla_{X_i} X_j = \sum_k A^k_{ij} X_k.$$

Dass ∇ torsionsfrei ist, heißt nichts Anderes, als dass A^k_{ij} symmetrisch in den beiden unteren Indizes sei.

Dieser eindeutig existierende Zusammenhang heißt *Levi-Civita-Zusammenhang* von M (mit Metrik g). Die Einträge A^k_{ij} seiner Zusammenhangsform bzgl. einer lokalen Basis heißen *Christoffel-Symbole*, und der parallele Transport bezüglich ∇ heißt *Levi-Civita-Transport*. Dieser ist genau die mathematische Formulierung dessen, was man naiv-anschaulich als parallelen Transport bezeichnen würde.

2. Betrachte $M = S^2$, die 2-Sphäre als Untermannigfaltigkeit von \mathbb{R}^3 . Auf $U := M \setminus \{(0, 0, \pm 1)\}$ betrachte die Karte

$$\phi : (x, y, z) \mapsto (\arccos(z), \arg(x + iy)) \quad (1.17)$$

(Kugelkoordinaten). Analog zu Beispiel A.0.6 definiert diese Karte eine Basis (X_1, X_2) von $\Gamma(\pi, U)$ der (lokalen) Schnitte des Tangentialbündels π .

Bezüglich dieser Basis hat die Einschränkung auf TM des Skalarprodukts auf $T\mathbb{R}^3$ die Koordinaten

$$g(X_i, X_j) = g_{ij} \quad g_{ij}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sin^2(\theta) \end{pmatrix}_{ij}. \quad (1.18)$$

Der Kürze halber werden die Punkte von M mit ihren Koordinaten unter ϕ identifiziert und die Koordinaten (θ, ϕ) so oft wie möglich unterdrückt.

Ist nun ∇ der Levi-Civita-Zusammenhang von M mit Metrik g , so ergeben sich nach einiger Rechnung die Komponenten

$$A^2_{12} = A^2_{21} = \cot(\theta), \quad A^k_{ij} = 0 \quad (\text{sonst}). \quad (1.19)$$

Hieraus resultiert eine nicht-verschwindende Krümmungsform, beim parallelen Transport entlang einer geschlossenen Kurve γ verändert sich ein Tangentialvektor also. Diese Veränderung wird als *Holonomie* beschrieben, und sie ist die Eigenschaft, die gekrümmte Flächen von nicht-gekrümmten unterscheidet (diese Aussage lässt sich in gewisser Weise auf das Theorema Egregium zurückführen).

Es ist vor allem so, dass der Tangentialvektor um einen Winkel Ω gedreht wird, welcher genau der durch γ eingeschlossene Raumwinkel ist (da die Kugel Radius 1 hat also genau die umschlossene Fläche). Exemplarisch lässt sich dies durch einen Pfeil verdeutlichen, der im Punkt $(1, 0, 0)$ nach Norden zeigt, dann mit konstantem ϕ nach $(0, 0, 1)$ verschoben wird, mit konstantem ϕ nach $(0, 1, 0)$ verschoben wird, und anschließend mit konstantem θ zurück nach $(1, 0, 0)$ verschoben wird. Dieser Weg ist in Abbildung 2 abgebildet. Wie deutlich wird, dreht sich der Tangentialvektor um $\frac{\pi}{2}$. Da die Kurve ein Achtel der Kugeloberfläche umschließt, umschließt sie also auch einen Raumwinkel von $\frac{\pi}{2}$.

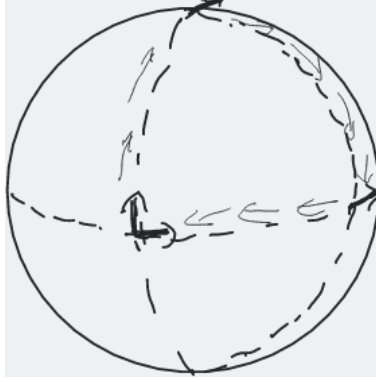


Abbildung 2: Paralleler Transport eines Tangentialvektors auf einer Kugeloberfläche

1.2.10 Beispiel (Physikalische Relevanz von Zusammenhängen): Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^4$ offen, $E := \mathbb{C} \times \Omega$ und $\pi : E \rightarrow \Omega$ die Projektion auf die zweite Komponente. Sei $(\nabla_\mu)_\mu$ ein komplexer Zusammenhang auf π . Für einen Schnitt $f \in \Gamma(\pi)$ ist nun

$$f(x) = (f_1(x), x) = f_1(x) \cdot (1, x), \quad (1.20)$$

wobei \cdot die Skalierung im $C^\infty(\Omega)$ -Modul $\Gamma(\pi)$ ist. Wenn wir die Abbildung $(\lambda \mapsto (1, \lambda)) \in \Gamma(\pi)$ als 1 bezeichnen, ist $f = f_1 1$. Mit der Leibniz-Regel folgt

$$\nabla_\mu f = (\partial_\mu f_1)1 + f_1 \nabla_\mu 1, \quad (1.21)$$

wobei $\nabla_i 1 \in \Gamma(\pi)$. Definiere nun $\mathfrak{T}_\mu := \nabla_\mu 1$ mit $\mathfrak{T}_\mu(\lambda) =: (\mathfrak{T}_{\mu,1}(\lambda), \lambda)$. Dann ist

$$(\nabla_\mu f)_1 = \partial_\mu f_1 + \mathfrak{T}_{\mu,1} f_1 = (\partial_\mu + \mathfrak{T}_{\mu,1}) f_1. \quad (1.22)$$

Die Funktionen $\mathfrak{T}_\mu : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ determinieren $(\nabla_\mu)_\mu$ und bilden die Zusammenhangsform bezüglich des Standard-Zusammenhangs. Prinzipiell sind die \mathfrak{T}_μ frei wählbar, wir treffen nun allerdings zusätzlich noch die Annahme, dass $(\nabla_\mu)_\mu$ sich (ähnlich wie in Beispiel 1.2.9) mit dem Standard-Skalarprodukt auf $\Gamma(\pi)$

$$\langle f|g \rangle := \overline{f_1} g_1 \quad (f, g \in \Gamma(\pi)) \quad (1.23)$$

verträgt. Das bedeutet konkret

$$\partial_\mu \langle f|g \rangle = \langle \nabla_\mu f|g \rangle + \langle f|\nabla_\mu g \rangle \quad (f, g \in \Gamma(\pi)). \quad (1.24)$$

In unserem Fall heißt das,

$$\begin{aligned} \partial_\mu \langle f|g \rangle &= \langle \nabla_\mu f|g \rangle + \langle f|\nabla_\mu g \rangle \\ &= \partial_\mu (\overline{f_1} g_1) = \overline{\partial_\mu f_1} g_1 + \overline{\mathfrak{T}_{\mu,1} f_1} g_1 + \overline{f_1} (\partial_\mu g_1 + \mathfrak{T}_{\mu,1} g_1) \\ &= \overline{\partial_\mu f_1} g_1 + \overline{f_1} \partial_\mu g_1 = \overline{\partial_\mu f_1} g_1 + \overline{f_1} \partial_\mu g_1 + (\overline{\mathfrak{T}_{\mu,1}} - \mathfrak{T}_{\mu,1}) \overline{f_1} g_1 \end{aligned} \quad (1.25)$$

für alle $f, g \in \Gamma(\pi)$. Es folgt, dass $\mathfrak{T}_{\mu,1}$ in jedem Punkt rein imaginär ist. Schreiben wir nun $\mathfrak{T}_{\mu,1} = \frac{ie}{\hbar c} A_\mu$ für rein reelle Skalarfelder A_μ .

Betrachten wir nun die Klein-Gordon-Gleichung für ein freies Feld,

$$0 = \left(-\eta^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi \quad (1.26)$$

($\eta^{\mu\nu}$ die Lorentz-Metrik und Einstein'sche Summenkonvention) und ersetzen die ∂_μ durch ∇_μ , so erhalten wir

$$\begin{aligned} m^2 c^2 \psi &= -\hbar^2 \eta^{\mu\nu} \nabla_\mu \nabla_\nu \psi \\ &= \eta^{\mu\nu} \left(-i\hbar \partial_\mu + \frac{e}{c} A_\mu \right) \left(-i\hbar \partial_\nu + \frac{e}{c} A_\nu \right) \psi, \end{aligned} \quad (1.27)$$

die Klein-Gordon-Gleichung für ein geladenes Feld, welches mit dem elektromagnetischen Feld (mit Vektorpotenzial A_μ) wechselwirkt.

Betrachten wir nun in unserer Expansion in Gleichung 1.21 statt 1 eine andere Orthonormalbasis von $\Gamma(\pi)$, etwa $\eta(x) := (\exp(-i\chi(x)), \lambda)$ für ein Skalarfeld $\chi \in C^\infty(\Omega)$. Gleichung 1.21 lautet dann

$$\begin{aligned} \nabla_\mu f(x) &= \left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} f_1(x) \exp(i\chi(x)) \right) \eta(x) + f_1(x) \exp(i\chi(x)) \nabla_\mu \eta(x) \\ &= (\partial_\mu f_1(x) + i(\partial_\mu \chi(x)) f_1(x)) \eta(x) + f_1(x) \exp(i\chi(x)) \nabla_\mu \eta(x). \end{aligned} \quad (1.28)$$

Analog zu Gleichung 1.25 folgt, dass $\exp(i\chi(x)) \nabla_\mu \eta(x) \in \mathbb{C}$ für alle $x \in \Omega$. Mit der Bezeichnung $\tilde{\mathfrak{T}}_\mu(x) := \exp(i\chi(x)) \nabla_\mu \eta(x)$ folgt nun

$$(\nabla_\mu f(x))_1 = \partial_\mu f_1(x) + (\tilde{\mathfrak{T}}_{\mu,1} + i\partial_\mu \chi(x)) f_1(x).$$

Es gilt also $\mathfrak{T}_{\mu,1} = \tilde{\mathfrak{T}}_{\mu,1} + i\partial_\mu \chi$. Rechnen wir das nun auf das Vektorpotenzial \tilde{A}_μ mit $\tilde{\mathfrak{T}}_{\mu,1} = \frac{ie}{\hbar c} \tilde{A}_\mu$ um, so erhalten wir

$$\tilde{A}_\mu = A_\mu - \frac{\hbar c}{e} \partial_\mu \chi,$$

was einer Eichtransformation des Vektorpotenzials entspricht.

Berechnen wir nun noch die Krümmungsform von ∇ , so ergibt sich

$$R_{\mu\nu} = \partial_\mu \mathfrak{T}_{\nu,1} - \partial_\nu \mathfrak{T}_{\mu,1} = \frac{ie}{\hbar c} (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) = \frac{ie}{\hbar c} F_{\mu\nu},$$

ein Vielfaches des elektromagnetischen Feldstärketensors.

Wir sehen also, dass man mittels der Sprache der Zusammenhänge in bestehende physikalische Theorie Kraftfelder wie das elektromagnetische Feld hinzufügen kann. Hierbei entsprechen die Komponenten der Zusammenhangsform den Potenzialen und die Komponenten der Krümmungsform den Feldstärken. Eichtransformation dieser Kraftfelder korrespondieren zur Wahl einer anderen Basis des Vektorbündels, sie ändern zwar die Darstellung (kompliziertes Transformationsverhalten der Zusammenhangsform), jedoch nicht die zugrundeliegende Physik (einfaches Transformationsverhalten der Krümmungsform).

Aufgrund der basisunabhängigen (und somit unter Eichtransformationen invarianten) Beschreibung der Kraftfelder durch den Zusammenhang sind Zusammenhänge die natürliche Sprache, in der über sie gesprochen wird. Im hier betrachteten Fall kann die Basis durch (lokale) Variation der Phase verändert werden, also durch Transformation mit $U(1)$. Daher werden Quantenfeldtheorien, die auf diese Weise die elektromagnetische Wechselwirkung einführen, auch als $U(1)$ -Yang-Mills-Quantenfeldtheorien bezeichnet.

1.3 Konstruktion des Berry-Zusammenhangs

In diesem Abschnitt betrachten wir das Vektorbündel aus Beispiel 1.1.3 noch einmal genauer, denn dies ist genau der Kontext der Berry-Phase. Diese Phase tritt bei Zeitentwicklung eines Eigenzustands auf, wenn sich die Parameter des Hamiltonoperators langsam ändern. In der Sprache des Modells wird bei langsamer Parametervariation entlang dem Weg γ der Zustand von der Faser über $\gamma(t_0)$ in die Faser über $\gamma(t_1)$ parallel verschoben, d.h. die unendlich langsame Parametervariation dient als physikalische Realisierung eines parallelen Transports auf dem Vektorbündel π . Dieser parallele Transport wird von einem Zusammenhang erzeugt, dem *Berry-Zusammenhang* (engl. Berry connection). Diesen werden wir in diesem Abschnitt finden.

Der erste Ansatz, den es sich zu untersuchen lohnt, ist die normale Ableitung, also

$$\nabla_i s(\lambda) := (\partial_i s(\lambda)_1, \lambda) \quad (s \in \Gamma(\pi)) \quad (1.29)$$

(die Eins bedeutet, dass wir uns nur für die erste Komponente, den Vektoranteil, interessieren; die zweite Komponente muss λ sein). Diese Definition erfüllt offenbar die Linearität und die modifizierte Leibniz-Regel. Die viel wichtigere Frage ist jedoch, ob ∇_i wohldefiniert ist, insbesondere ob diese Abbildungsvorschrift überhaupt Elemente von $\Gamma(\pi)$ liefert. Da die erste Komponente jedes Schnittes von π als glatte Funktion von Ω nach \mathbb{C}^m aufgefasst werden kann, ist $\partial_i s(\lambda)_1 \in \mathbb{C}^m$. Im Allgemeinen wird diese Ableitung jedoch kein Element des Eigenraums E_λ sein. Den Zusammenhang so zu definieren, funktioniert also nicht.

Als nächstes kann man nun probieren, die letzte Idee etwas zu modifizieren: Sei für $\lambda \in \Omega$ jeweils $P_\lambda : \mathbb{C}^m \rightarrow E_\lambda$ der orthogonale Projektionsoperator auf E_λ , und sei

$$\nabla_i s(\lambda) := (P_\lambda \partial_i s(\lambda)_1, \lambda) \quad (s \in \Gamma(\pi)). \quad (1.30)$$

Ein Schnitt von π wird also „normal“ abgeleitet und anschließend auf den richtigen Eigenraum zurückprojiziert.

1.3.1 Lemma: Die in Gleichung 1.30 definierte Abbildungsschar $(\nabla_i)_i$ definiert einen Zusammenhang auf dem Vektorbündel aus Beispiel 1.1.3.

Beweis. Es sind drei Dinge zu prüfen:

Wohldefiniertheit Sei $s \in \Gamma(\pi)$. Insbesondere ist s somit eine glatte Abbildung $s : \Omega \rightarrow \mathbb{C}^m \times \Omega$, mit $s(\lambda)_1 \in E_\lambda$ und $s(\lambda)_2 = \lambda$. Da die erste

Komponente s_1 glatt ist, existieren alle partiellen Ableitungen $\partial_i s_1$ und sind ebenfalls glatte Funktionen $\Omega \rightarrow \mathbb{C}^m$. Da der Hamiltonoperator H eine glatte Funktion ist, ist auch die Projektorfunktion P_λ eine glatte Funktion des Parameters λ . Somit ist auch der Ausdruck

$$P_\lambda \partial_i s(\lambda)_1 \quad (1.31)$$

glatt in λ . Da P_λ auf E_λ abbildet, ist somit

$$\lambda \mapsto (P_\lambda \partial_i s(\lambda)_1, \lambda) \in \Gamma(\pi). \quad (1.32)$$

\mathbb{C} -Linearität Die Rechenoperationen auf $\Gamma(\pi)$ sind so definiert, dass sie sich innerhalb der Fasern abspielen, d.h. es verändert sich nur die erste Komponente. Seien $\alpha \in \mathbb{C}$ und $s, t \in \Gamma(\pi)$, dann ist $(\alpha s + t)_1 = \alpha s_1 + t_1$, d.h.

$$(\nabla_i(\alpha s + t)(\lambda))_1 = P_\lambda \partial_i(\alpha s + t)_1(\lambda) = \alpha(\nabla_i s(\lambda))_1 + (\nabla_i t(\lambda))_1, \quad (1.33)$$

da sowohl P_λ als auch ∂_i \mathbb{C} -lineare Abbildungen sind.

Leibniz-Regel Sei $f \in C^\infty(\Omega, \mathbb{C})$, $s \in \Gamma(\pi)$. Dann ist wieder aufgrund der Definition der Rechenoperationen $(fs)_1 = fs_1$. Folglich

$$\begin{aligned} \nabla_i(fs)(\lambda)_1 &= P_\lambda \partial_i(fs_1)(\lambda) \\ &= P_\lambda((\partial_i f(\lambda))s(\lambda)_1 + f(\lambda)\partial_i s(\lambda)_1) \\ &= \partial_i f(\lambda)P_\lambda s(\lambda)_1 + f(\lambda)P_\lambda \partial_i s(\lambda)_1 \\ &= \partial_i f(\lambda)s(\lambda)_1 + \nabla_i s(\lambda)_1. \quad \square \end{aligned} \quad (1.34)$$

Mit dem soeben definierten $(\nabla_i)_i$ haben wir also einen vielversprechenden Kandidaten für einen Zusammenhang auf E . Es ist nun die Frage, ob dies bereits der Berry-Zusammenhang ist, also ob der dadurch erzeugte parallele Transport bereits durch unendlich langsame Zeitentwicklung physikalisch realisiert werden kann.

Es folgt jedoch zunächst ein Lemma, das uns hilft, besser zu beurteilen, ob eine Kurve in E parallel bezüglich dem oben definierten Zusammenhang ist.

1.3.2 Lemma: Sei $\tilde{\gamma} : [0, 1] \rightarrow E$ eine Kurve, wobei wir $\tilde{\gamma}(t) = (\psi(t), \gamma(t))$ schreiben, also $\tilde{\gamma}$ in einen zeitabhängigen Zustand und einen Weg im Parameterraum aufspalten.

Genau dann ist $\tilde{\gamma}$ parallel bzgl. des Zusammenhangs aus Gleichung 1.30, wenn $\dot{\psi}(t) \perp E_{\gamma(t)}$ für alle $t \in [0, 1]$ (hierbei ist $\dot{\psi}$ die Ableitung nach dem „Zeit“-Parameter t).

Beweis. Sei $U \subseteq [0, 1]$ eine (relativ) offene Menge, auf der γ injektiv ist. Jeder Punkt t , der nicht durch eine solche Menge erfasst wird, erfüllt die Bedingung $\dot{\gamma}(t) = 0$, d.h. dort ist die Parallelitätsbedingung, dass die Ableitung (mit dem Zusammenhang) von ψ „in Richtung“ von $\dot{\gamma}(t)$ verschwindet, trivialerweise erfüllt.

Auf $\gamma(U)$ sei nun γ^{-1} die (lokale) Umkehrabbildung von γ . Dann lässt sich die Parallelitätsbedingung schreiben als

$$0 = \sum_{i=1}^n \dot{\gamma}(t)^i \nabla_i (\psi \circ \gamma^{-1})(\gamma(t)), \quad (1.35)$$

wobei $0 \in \Gamma(\pi, U)$ der Schnitt ist, der jedem Punkt den Vektor 0 zuordnet. Dies ist eine Forderung an die erste Komponente des resultierenden Schnitts. Ausgeschrieben heißt das

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{i=1}^n \dot{\gamma}(t)^i P_{\gamma(t)} \partial_i (\psi \circ \gamma^{-1})(\gamma(t)) \\ &= P_{\gamma(t)} \sum_{i=1}^n \partial_i (\psi \circ \gamma^{-1})(\gamma(t)) \dot{\gamma}(t)_i \\ &= P_{\gamma(t)} \dot{\psi}(t). \end{aligned} \quad (1.36)$$

Das bedeutet, dass $\dot{\psi}(t)$ orthogonal auf $E_{\gamma(t)}$ stehen muss.

Ist $E_{\gamma(t)}$ eindimensional (also $d = 1$ bzw. der Eigenwert nicht ausgeartet), so wird für $\psi(t) \neq 0$ der Eigenraum durch $\psi(t)$ aufgespannt, d.h. die Bedingung ist äquivalent zu $\langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle = 0$. \square

1.3.3 Satz (Idee nach [Sim83]): Der Zusammenhang aus Gleichung 1.30 ist der Berry-Zusammenhang.

Beweis. Die Behauptung gilt genau dann, wenn Transport durch unendlich langsame Zeitentwicklung (unter Vernachlässigung dynamischer Phasen) parallele Kurven hervorbringt.

Sei $\gamma : [0, 1] \rightarrow \Omega$ ein glatter Weg und sei $(\Psi_i)_{1 \leq i \leq d}$ eine Basis von $E_{\gamma(0)}$. Für $s > 0$ betrachte nun die Lösung ψ_i^s des Anfangswertproblems

$$\begin{aligned} \psi_i^s(0) &= \Psi_i \\ i\hbar \dot{\psi}_i^s(t) &= (H(\gamma(t/s)) - \varepsilon(\gamma(t/s))) \psi_i^s(t), \end{aligned} \quad (1.37)$$

sodass ψ_i^s einer Zeitentwicklung des Zustands Ψ_i entspricht, wobei der Parameterweg mit der Geschwindigkeit $1/s$ durchfahren wird, und wobei die dynamische Phase vernachlässigt wird.

Gehen wir nun von der Interpretation von t als Zeit wieder zurück zur Interpretation als Wegparameter. Definiere dazu $\eta_i^s : [0, 1] \rightarrow \mathbb{C}^m$ durch $\eta_i^s(t) := \psi_i^s(st)$. Dann löst η_i^s das Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} \eta_i^s(0) &= \Psi_i \\ i\hbar \dot{\eta}_i^s(t) &= s(H(\gamma(t)) - \varepsilon(\gamma(t))) \eta_i^s(t). \end{aligned} \quad (1.38)$$

Definiere $\eta_i(t) := \lim_{s \rightarrow \infty} \eta_i^s(t)$. Da hier die dynamische Phase herausgerechnet wurde, oszilliert $\eta_i^s(t)$ nicht, wenn s erhöht wird, sondern nähert sich immer näher der Funktion η_i an. Nach dem adiabatischen Theorem gilt ferner

$H(\gamma(t))\eta_i(t) = \varepsilon(\gamma(t))\eta_i(t)$ in jedem Punkt $\gamma(t)$ des Wegs. Ferner sind die $(\eta_i(t))_i$ für jedes $t \in [0, 1]$ linear unabhängig. Wegen der Linearität der Schrödingergleichung und der Grenzwertbildung lässt sich die unendlich langsame Zeitentwicklung η eines beliebigen Anfangszustands

$$\Psi = \sum_{i=1}^d c^i \Psi_i \quad (1.39)$$

schreiben als

$$\eta(t) = \sum_{i=1}^d c^i \eta_i(t). \quad (1.40)$$

Die Behauptung ist nun, dass jede so entstandene Kurve parallel bezüglich des Zusammenhangs aus Gleichung 1.30 ist. Das heißt, es genügt zu zeigen, dass $\langle \eta_i(t) | \dot{\eta}_j(t) \rangle = 0$ für alle $t \in [0, 1]$ und für $1 \leq i, j \leq d$. Dann folgt die Aussage aus der Linearität und der Charakterisierung der Parallelität aus Lemma 1.3.2.

Sei $f \in C_c^\infty(0, 1)$ eine glatte Funktion mit kompaktem Träger, und seien $1 \leq i, j \leq d$, dann ist

$$\int f(t) \langle \eta_i(t) | \dot{\eta}_j(t) \rangle dt = \int f(t) \left\langle \lim_{s \rightarrow \infty} \eta_i^s(t) \middle| \dot{\eta}_j(t) \right\rangle dt. \quad (1.41)$$

Mit der Stetigkeit des Skalarprodukts und dem Satz über dominierte Konvergenz (nach der Cauchy-Schwarz-Ungleichung ist der Integrand dominiert durch $f(t) \|\Psi_i\| \|\dot{\eta}_j(t)\|$) ist dies gleich

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \int f(t) \langle \eta_i^s(t) | \dot{\eta}_j(t) \rangle dt. \quad (1.42)$$

Partielle Integration und das Verschwinden der Randterme (f ist auf dem offenen Intervall $(0, 1)$ definiert und hat kompakten Träger) liefert Gleichheit mit

$$- \lim_{s \rightarrow \infty} \int \dot{f}(t) \langle \eta_i^s(t) | \eta_j(t) \rangle dt - \lim_{s \rightarrow \infty} \int f(t) \langle \dot{\eta}_i^s(t) | \eta_j(t) \rangle dt. \quad (1.43)$$

Mit derselben Begründung wie oben lässt sich der Satz über dominierte Konvergenz wieder auf den ersten Term anwenden. Mithilfe der Differenzialgleichung, der η_i^s genügt, lässt sich $\dot{\eta}_i^s(t)$ expandieren, sodass wir

$$- \int \dot{f}(t) \langle \eta_i(t) | \eta_j(t) \rangle dt + \lim_{s \rightarrow \infty} \int f(t) \left\langle \frac{is}{\hbar} (H(\gamma(t)) - \varepsilon(\gamma(t))) \eta_i^s(t) \middle| \eta_j(t) \right\rangle dt \quad (1.44)$$

erhalten.

Da jede Zeitentwicklung ein unitärer Operator ist, gilt $\langle \eta_i^s(t) | \eta_j^s(t) \rangle = \langle \Psi_i | \Psi_j \rangle$ für alle s, t , also insbesondere auch (wegen Stetigkeit des Skalarprodukts) im Grenzwert $s \rightarrow \infty$.

Das Skalarprodukt $\langle \eta(t) | \eta(t) \rangle$ ist somit die Konstante $\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle$, die sich vor das Integral ziehen lässt. Mit dem Hauptsatz der Integral- und Differenzialrechnung ist das verbleibende Integral über \dot{f} gleich „ $f(1) - f(0)$ “ (Grenzwerte gegen

1 und 0), also 0, da f am Rand verschwindet. Somit verschwindet der erste Term und nur der zweite verbleibt. Da $H(\gamma(t)) - \varepsilon(\gamma(t))$ ein selbstadjungierter Operator ist, lässt er sich auf die andere Seite des Skalarprodukts ziehen, sodass die Gleichungskette sich mit

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \int f(t) \left\langle \frac{is}{\hbar} \eta_i^s(t) \middle| (H(\gamma(t)) - \varepsilon(\gamma(t))) \eta_j(t) \right\rangle dt \quad (1.45)$$

fortsetzen lässt. Da bereits festgestellt wurde, dass jedes $\eta_i(t)$ immer ein Eigenvektor von $H(\gamma(t))$ zum Eigenwert $\varepsilon(\gamma(t))$ ist, ist der Integrand 0, also ist

$$\int f(t) \langle \eta_i(t) | \dot{\eta}_j(t) \rangle dt = 0. \quad (1.46)$$

Da die glatten Funktionen mit kompaktem Träger dicht in $L^2(0, 1)$ liegen und das Skalarprodukt von $L^2(0, 1)$ nicht ausgeartet ist, ist $t \mapsto \langle \eta_i(t) | \dot{\eta}_j(t) \rangle$, aufgefasst als Element von $L^2(0, 1)$, gleich der Null, also $\langle \eta_i(t) | \dot{\eta}_j(t) \rangle = 0$ für λ -fast alle t (μ : Lebesgue-Maß). Da diese Funktion stetig ist, folgt insbesondere, dass sie überall 0 ist. Somit ist jedes η_i parallel. \square

Da wir nun einen Ausdruck für den Berry-Zusammenhang haben, stellt sich die Frage, ob wir für den dazugehörigen parallelen Transport einen expliziteren Ausdruck finden können, der nicht erfordert, dass man die zeitabhängige Schrödingergleichung für überabzählbar viele Geschwindigkeiten löst.

Zunächst jedoch ein Lemma, das mit der Existenz einer globalen Trivialisierung des Vektorbündels π entlang eines Wegs zu tun hat.

1.3.4 Lemma: Sei $\gamma : [0, 1] \rightarrow \Omega$, dann existiert eine globale Basis $(\eta_i)_{1 \leq i \leq d}$ von $\Gamma(\pi)$ „entlang“ γ , d.h. eine Funktionenschar $\eta_i : [0, 1] \rightarrow \mathbb{C}^m$ mit

$$E_{\gamma(t)} = \text{span}_{\mathbb{C}}(\eta_i(t))_{1 \leq i \leq d} \quad (t \in [0, 1]) \quad (1.47)$$

Diese Basis trivialisiert das Vektorbündel π entlang des Wegs γ .

Man beachte, dass aus $\gamma(t_1) = \gamma(t_2)$ nicht unbedingt $\eta(t_1) = \eta(t_2)$ folgt. Man kann dieses Lemma also nicht dazu einsetzen, π global zu trivialisieren.

Ist γ geschlossen, so können die η_i allerdings so gewählt werden, dass $\eta_i(0) = \eta_i(1)$ für alle i .

Beweis. Seien $(U_i, \phi_i)_{i \in I}$ lokale Trivialisierungen von π , sodass $(U_i)_{i \in I}$ eine offene Überdeckung der Grundmenge ist. Dann ist die Familie $(\gamma^{-1}(U_i))_{i \in I}$ eine (relativ) offene Überdeckung von $[0, 1]$. Da das Intervall $[0, 1]$ kompakt ist, besitzt I eine endliche Teilmenge J , sodass $(\gamma^{-1}(U_i))_{i \in J}$ das Intervall $[0, 1]$ auch schon überdeckt. Seien dabei ohne Einschränkung die $(\gamma^{-1}(U_i))_{i \in J}$ Intervalle, die aufsteigend sortiert sind, etwa V_1, \dots, V_k mit den dazugehörigen Trivialisierungsabbildungen ϕ_1, \dots, ϕ_k , und bei denen nur eventuell $V_i \cap V_{i+1}$ nichtleer ist. Wir verfahren nun mit vollständiger Induktion.

$k = 1$: Dann ist $V_1 = [0, 1]$ und

$$\eta_i(t) := \phi_1^{-1}(e_i, \gamma(t))_1 \quad (1.48)$$

genügt bereits der Bedingung. (e_i ist hierbei der i -te kanonische Basisvektor von \mathbb{C}^d)

$k - 1 \rightarrow k$: Existiere bereits eine Schar $(\tilde{\eta}_i)_{1 \leq i \leq d}$ lokaler Basisvektorfelder auf $V_1 \cup \dots \cup V_{k-1}$. Definiere

$$\eta'_i(t) := \phi_k^{-1}(e_i, \gamma(t))_1 \quad (t \in V_k). \quad (1.49)$$

Auf $V_{k-1} \cap V_k$ definieren nun $(\tilde{\eta}_i)_i$ und $(\eta'_i)_i$ jeweils (glatt vom Parameter abhängige) Basen. Das bedeutet, es gibt eine glatte Funktion $a : V_{k-1} \cap V_k \rightarrow GL_d(\mathbb{C})$, sodass

$$\tilde{\eta}_i(t) = \sum_{j=1}^d a^j_i(t) \eta'_j(t). \quad (1.50)$$

Diese Funktion lässt sich glatt auf V_k fortsetzen. Falls am Rand eine Divergenz auftritt, so kann a entsprechend schon vorher anders weitergeführt werden.

Dann ist die Funktion

$$\eta(t)_i := \begin{cases} \tilde{\eta}_i(t) & t \in [0, 1] \setminus V_k \\ \sum_{j=1}^d a^j_i \eta'_j(t) & t \in V_k \end{cases} \quad (1.51)$$

eine (glatte) Basis auf $V_1 \cup \dots \cup V_k$, wie gesucht.

Ist γ geschlossen, so unterscheiden sich für die so gefundene global definierte Orthonormalbasis die Basen $(\eta_i(0))_i$ und $(\eta_j(1))_j$ nur um eine Matrix $g^j_i \in GL_d(\mathbb{C})$. Da die $GL_d(\mathbb{C})$ eine zusammenhängende Lie-Gruppe ist, ist jedes Element durch die Matrix-Exponentialfunktion erreichbar, d.h. es gibt eine symmetrische Matrix A mit $g = \exp(iA)$. Dann definiere

$$\tilde{\eta}_i(t) := \sum_{j=1}^d \exp(-itA)^j_i \eta_j(t). \quad (1.52)$$

Diese erfüllt die Behauptung. \square

Diese Aussage reduziert den parallelen Transport eines Zustands im Wesentlichen auf ein lineares Anfangswertproblem in \mathbb{C}^d .

1.3.5 Satz: Sei $\gamma : [0, 1] \rightarrow \Omega$ ein Weg und sei $(\eta_i)_{1 \leq i \leq d}$ eine globale Basis von π entlang γ (vg. Lemma 1.3.4) mit metrischem Tensor $g(t) \equiv g_{ij} = \langle \eta_i(t) | \eta_j(t) \rangle$.

1. In den Basen $(\eta_i(0))_{1 \leq i \leq d}$ und $(\eta_i(t))_{1 \leq i \leq d}$ hat der (bzgl. des Berry-Zusammenhangs) parallele Transport entlang γ die Matrixdarstellung

$$\Gamma(\gamma)_0^t = \mathcal{T} \exp \left(- \int_0^t g(\tau)^{-1} T(\tau) d\tau \right), \quad (1.53)$$

wobei $\mathcal{T}\exp$ die zeitgeordnete Exponentialfunktion und $T(t)$ die Matrix

$$T_{ij}(t) = \langle \eta_i(t) | \dot{\eta}_j(t) \rangle \quad (1.54)$$

ist.

Falls $(\eta_i)_{1 \leq i \leq d}$ eine Orthonormalbasis ist, so ist g überall die Einheitsmatrix, d.h. der Faktor g^{-1} fällt weg.

2. Ist $d = 1$ (also der Eigenwert überall nicht-ausgeartet), γ geschlossen und $\eta(0) = \eta(1)$, so ist $\Gamma(\gamma)_0^1$ die Multiplikation mit einem Faktor

$$\exp \left(- \int_0^1 \frac{\langle \eta(\tau) | \dot{\eta}(\tau) \rangle}{\langle \eta(\tau) | \eta(\tau) \rangle} d\tau \right). \quad (1.55)$$

Beweis. 1. Sei $\psi_0 \in E_{\gamma(0)}$ und sei ψ der parallele Transport von ψ_0 , also $\psi : [0, 1] \rightarrow E$ parallel bezüglich des Berry-Zusammenhangs mit $\psi(0)_1 = \psi_0$. Parallelität bzgl. des Berry-Zusammenhangs ist nach Lemma 1.3.2 genau dann erfüllt, wenn $\dot{\psi}(t)_1 \perp E_{\gamma(t)}$ für alle t . Das bedeutet $\langle \eta_i(t) | \dot{\psi}(t)_1 \rangle = 0$ für alle $t \in [0, 1]$ und $1 \leq i \leq d$.

Wir wählen den Ansatz $\psi(t)_1 = \sum_{i=1}^d c^i(t) \eta_i(t)$. Dann lautet die Parallelitätsbedingung

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{j=1}^d \langle \eta_i(t) | \dot{c}^j(t) \eta_j(t) + c^j(t) \dot{\eta}_j(t) \rangle \\ &= \sum_{j=1}^d \dot{c}^j(t) \langle \eta_i(t) | \eta_j(t) \rangle + \sum_{j=1}^d c^j(t) \langle \eta_i(t) | \dot{\eta}_j(t) \rangle. \end{aligned} \quad (1.56)$$

Mit $\langle \eta_i(t) | \eta_j(t) \rangle = g_{ij}$ und der oben definierten Matrix T lässt sich dies folgendermaßen schreiben:

$$g(t) \dot{c}(t) = -T(t) c(t) \quad (1.57)$$

bzw.

$$\dot{c} = -g(t)^{-1} T(t) c(t). \quad (1.58)$$

Diese Differenzialgleichung in \mathbb{C}^d lässt sich formal mit der zeitgeordneten Exponentialfunktion lösen, als

$$c(t) = \mathcal{T}\exp \left(- \int_0^t g(\tau)^{-1} T(\tau) d\tau \right) c(0). \quad (1.59)$$

Da es sich bei $c(t)$ um die Koeffizienten bzgl. der Basis $(\eta_i(t))_{1 \leq i \leq d}$ handelt, ist die darstellende Matrix von $\Gamma(\gamma)_0^t$ genau die Matrix

$$\mathcal{T}\exp \left(- \int_0^t g(\tau)^{-1} T(\tau) d\tau \right), \quad (1.60)$$

wie behauptet.

2. Für $d = 1$ ist der Integrand ein Skalar, d.h. die Exponentialfunktion kann ihre Zeitordnung verlieren. Einsetzen von $t = 1$ in den obigen Ausdruck ergibt

$$\Gamma(\gamma)_0^1 = \exp \left(- \int_0^1 \frac{\langle \eta(t) | \dot{\eta}(t) \rangle}{\langle \eta(t) | \eta(t) \rangle} dt \right) \quad (1.61)$$

als 1×1 -Matrixdarstellung bezüglich der Basen $(\eta(0))$ und $(\eta(1)) = (\eta(0))$. Es handelt sich hierbei offensichtlich nur um die Multiplikation mit einem skalaren Faktor. \square

Nun kehren wir wieder zu einem allgemeineren Fall zurück, bei dem wir nicht entlang eines Wegs integrieren, und fragen uns stattdessen, wie genau die Zusammenhangsform und die Krümmungsform des Berry-Zusammenhangs bezüglich einer beliebigen lokalen Trivialisierung aussehen.

1.3.6 Bemerkung: Analog zu den Begrifflichkeiten aus Lemma 1.3.4 ist es sinnvoll, den Begriff der lokalen Basis eines Vektorbündels einzuführen. Sei dazu (U, ϕ) eine lokale Trivialisierung des Vektorbündels $\pi : E \rightarrow \Omega$. Dann definiere $\eta_i(\lambda) := \phi^{-1}(e_i, \lambda)_1$. Für jedes $\lambda \in U$ ist nun $(\eta_i(\lambda))_{1 \leq i \leq d}$ eine Basis von E_λ , die jedoch nur für $\lambda \in U$ definiert ist.

1.3.7 Lemma: Sei (U, ϕ) eine lokale Trivialisierung des Vektorbündels aus Beispiel 1.1.3 und sei $(\nabla'_i)_i$ der dadurch erzeugte Zusammenhang (vgl. Beispiel 1.2.4). Sei ferner $(\eta_i)_{1 \leq i \leq d}$ die lokale Basis von π , die durch die Trivialisierung ϕ erzeugt wird, und sei $g(t) \equiv g_{ij}(t) = \langle \eta_i(t) | \eta_j(t) \rangle$ ihr metrischer Tensor. Sei außerdem $(\nabla_i)_i$ der Berry-Zusammenhang.

Für $s \in \Gamma(\pi)$ mit $s(\lambda) = \left(\sum_{i=1}^d c^i(\lambda) \eta_i(\lambda), \lambda \right)$ ist

$$\nabla_i s(\lambda) - \nabla'_i s(\lambda) = \left(\sum_{j=1}^d (g(\lambda)^{-1} \tilde{A}_i(\lambda) c(\lambda))^j \eta_j(\lambda), \lambda \right) \quad (1.62)$$

mit

$$(\tilde{A}_i)_{jk}(\lambda) = \langle \eta_j(\lambda) | \partial_i \eta_k(\lambda) \rangle \quad (1.63)$$

Das bedeutet: die Differenz der Zusammenhänge ist eine $C^\infty(U, \mathbb{C})$ -lineare Funktionenschar, die mit der Basis $(\eta_i(\lambda))_{1 \leq i \leq d}$ als matrixwertige Funktionenschar $A_i := g^{-1} \tilde{A}_i$ geschrieben werden kann. Das macht $(A_i)_{1 \leq i \leq d}$ zur Zusammenhangsform der Berry-Phase (unter der Trivialisierung ϕ).

Beweis. Seien $s, (\eta_i)_i, c$ wie vorausgesetzt. Dann ist

$$\begin{aligned} \nabla'_i s(\lambda)_1 &= \sum_{j=1}^d \nabla'_i (c^j \eta_j, \cdot)(\lambda) \\ &= \sum_{j=1}^d c^j(\lambda) \nabla'_i (\eta_j, \cdot)(\lambda) + \sum_{j=1}^d (\partial_i c^j(\lambda)) \eta_j(\lambda). \end{aligned} \quad (1.64)$$

Da ∇'_i gerade so definiert ist, dass die (η_i, \cdot) parallel sind, fällt der erste Term weg. Es verbleibt

$$\nabla'_i s(\lambda)_1 = \sum_{j=1}^d (\partial_i c^j(\lambda)) \eta_j(\lambda). \quad (1.65)$$

Andererseits ist

$$\nabla_i s(\lambda)_1 = \sum_{j=1}^d P_\lambda \partial_i (c^j \eta_j)(\lambda) = \sum_{j=1}^d (\partial_i c^j(\lambda)) \eta_j(\lambda) + \sum_{j=1}^d c^j(\lambda) P_\lambda \partial_i \eta_j(\lambda). \quad (1.66)$$

Nun drücken wir die orthogonale Projektion P_λ auf den Unterraum E_λ rechnerisch aus. Für $v = \sum_{i=1}^d a^i \eta_i(\lambda) \in E_\lambda$ ist

$$\begin{aligned} \sum_{j,k=1}^d g^{jk}(\lambda) \langle \eta_k(\lambda) | v \rangle \eta_j(\lambda) &= \sum_{i,j,k=1}^d a^i g^{jk}(\lambda) \langle \eta_k(\lambda) | \eta_i(\lambda) \rangle \eta_j(\lambda) \\ &= \sum_{j=1}^d (g(\lambda)^{-1} g(\lambda) a)^j \eta_j(\lambda) \\ &= v \end{aligned} \quad (1.67)$$

(g^{ij} sind die Einträge von g^{-1}), während jeder Vektor aus E_λ^\perp auf den Nullvektor abgebildet wird. Dieser Ausdruck ist also der Projektor auf E_λ .

Wir erhalten also

$$\nabla_i s(\lambda)_1 = \sum_{j=1}^d (\partial_i c^j(\lambda)) \eta_j(\lambda) + \sum_{j,k,l=1}^d c^l(\lambda) g^{jk} \langle \eta_k(\lambda) | \partial_i \eta_l(\lambda) \rangle \eta_j(\lambda) \quad (1.68)$$

Dies hat zur Folge, dass

$$(\nabla_i - \nabla'_i) s(\lambda)_1 = \sum_{j=1}^d (g(\lambda)^{-1} \tilde{A}_i(\lambda) c(\lambda))^j \eta_j(\lambda). \quad (1.69)$$

Die Differenz der Zusammenhänge hat also die behauptete Form. \square

1.3.8 Bemerkung: Vergleichen wir dieses Resultat mit dem letzten, so fällt auf, dass der Berry-„Phasenfaktor“ (für beliebige Vielfachheit des Eigenwerts ε von H) nichts anderes ist, als eine weg-geordnete Exponentialfunktion der negativen Zusammenhangsform.

1.3.9 Lemma: Ist $d = 1$ und seien (U, ϕ) eine lokale Trivialisierung des Vektorbündels $\pi : E \rightarrow \Omega$ und $\psi : \Omega \rightarrow \mathbb{C}^m$ die dadurch erzeugte lokale Basis. Dann hat die Krümmungsform des Berry-Zusammenhangs die Form

$$R_{ij} = 2i \operatorname{Im} \frac{\langle \partial_i \psi | \partial_j \psi \rangle \langle \psi | \psi \rangle - \langle \partial_i \psi | \psi \rangle \langle \psi | \partial_j \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle^2} \quad (1.70)$$

Beweis. Nach Lemma 1.3.7 hat der Berry-Zusammenhang bezüglich (U, ϕ) die Zusammenhangsform

$$A_i(\lambda) = \frac{\langle \psi(\lambda) | \partial_i \psi(\lambda) \rangle}{\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle}. \quad (1.71)$$

Nach Definition 1.2.7 gilt

$$R_{ij}(\lambda) = \partial_i A_j(\lambda) - \partial_j A_i(\lambda) + [A_i(\lambda), A_j(\lambda)]. \quad (1.72)$$

Da die A_i Operatoren auf \mathbb{C} sind, kommutieren sie alle, d.h. der letzte Term fällt weg. Es verbleibt

$$R_{ij} = 2i \operatorname{Im} \frac{\langle \partial_i \psi | \partial_j \psi \rangle \langle \psi | \psi \rangle - \langle \partial_i \psi | \psi \rangle \langle \psi | \partial_j \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle^2}. \quad (1.73)$$

Da ψ glatt ist, sind hierbei die gemischten zweiten Ableitungen gleich und fallen weg. \square

1.4 Zwei Sonderfälle für $d = 1$

In Bemerkung 1.3.8 wurde bereits festgestellt, dass sich die Berry-Phase aus dem Wegintegral der Zusammenhangsform des Berry-Zusammenhangs gewinnen lässt. Falls der Weg γ ein geschlossener Weg ist, der sich als Rand einer Fläche darstellen lässt, lässt sich der Ausdruck noch weiter vereinfachen: Mit dem Satz von Stokes kann man dieses Integral durch ein Flächenintegral der Krümmung ersetzen, also

$$\Gamma(\gamma)_0^1 = \exp \left(- \sum_{i,j=1}^n \int_S R_{ij} dx_i \wedge dx_j \right). \quad (1.74)$$

Unter Verwendung der korrekten differenzialgeometrischen Notation aus Bemerkung 1.2.8 lässt sich dies als

$$\exp \left(- \int_S R \right) \quad (1.75)$$

schreiben.

Wenn man einen globalen Eigenzustand ψ wählen kann, so ist jedes A_i eine rein reelle Größe, d.h. bei parallelem Transport entlang einer Kurve wird der Zustand nur (reell) reskaliert, und zwar derart, dass die Norm konstant bleibt, denn Zeitentwicklung mit der Schrödingergleichung ist unitär, also normerhaltend. Dies hat insbesondere zur Folge, dass keine Berry-Phase auftreten kann.

Wenn der Eigenzustand hingegen nur *lokal* als reeller Vektor gewählt werden kann, also wenn es möglich ist, die Grundmenge Ω so mit lokalen Basen $(U_i, \eta_i)_{i \in I}$ zu überdecken, dass überall $\eta_i(\lambda) \in \mathbb{R}^m$ gilt, so folgt zwar ebenfalls, dass die Krümmung gleich Null ist. Das bedeutet jedoch nicht, dass keine Berry-Phase auftreten kann. Hier tritt nämlich der Fall auf, dass die Berry-Phase bei



Abbildung 3: Fläche, die durch zwei homotope Kurven eingeschlossen wird

Zeitentwicklung entlang eines Wegs γ von der Homotopieklasse (vgl. Anhang B) dieses Wegs abhängt.

Um das zu sehen, seien c_1, c_2 glatte, zueinander ∞ -homotope Kurven. Sei ϕ eine Homotopie, die zwischen c_1, c_2 interpoliert. Insbesondere ist dann $S := \phi([0, 1] \times [0, 1])$ selbst eine Mannigfaltigkeit mit Rand (bzw. bis auf Lebesgue-Nullmengen eine disjunkte Vereinigung von Mannigfaltigkeiten mit Rand), deren Rand gerade durch c_1, c_2 parametrisiert wird, welche jedoch in entgegengesetzte Richtungen durchlaufen werden müssen (vgl. Abbildung 3). Das Flächenintegral der Berry-Krümmung ist gleich Null, da die Krümmung auf S verschwindet. Für das Integral der Zusammenhangsform gilt folglich

$$0 = \int_S dA = \int_{\partial S} A = \int_{\gamma_1} A - \int_{\gamma_2} A. \quad (1.76)$$

Somit wird beim Durchlaufen beider Wege die gleiche Berry-Phase akkumuliert.

Analog lässt sich folgern, dass das Integral sich für die Konkatination zweier Wege addiert, also

$$\int_{\gamma_1 || \gamma_2} A = \int_{\gamma_1} A + \int_{\gamma_2} A, \quad (1.77)$$

sprich: die Berry-Phasen multiplizieren sich. Somit ist die Berry-Phase ein Gruppenhomomorphismus $\pi_1(\Omega) \rightarrow \mathbb{C}^*$ (wobei $\mathbb{C}^* = \mathbb{C} \setminus \{0\}$ mit der Multiplikation ausgestattet ist). Mit anderen Worten, die Berry-Phase ist ein Charakter der Fundamentalgruppe.

1.5 Sonderfälle für $d > 1$

Im ausgearbeiteten Fall erhält man dieselben Resultate, nur ist hierfür etwas mehr Arbeit nötig, die wir hier nicht im Detail ausführen werden. Wir definieren zu einem Punkt $x \in \Omega$ (bei fixierter Basis von $\pi^{-1}(\{x\})$) die *Holonomiegruppe* in x , i.Z. $\text{Hol}_x(\Omega) \leq GL_d(\mathbb{C})$, als die Gruppe der Berry-Phasen, die durch parallelen Transport entlang eines geschlossenen Wegs in Γ erhalten werden können, also

$$\text{Hol}_x(\Omega) := \{\Gamma(\gamma)_0^1 \mid \gamma \in \Pi^1(\Omega, x)\} \quad (1.78)$$

(jeweils die Darstellung der linearen Abbildung $\Gamma(\gamma)_0^1 : \pi^{-1}(\{x\}) \rightarrow \pi^{-1}(\{x\})$ in der fixen Basis).

Analog definiere die *beschränkte Holonomiegruppe*

$$\text{Hol}_x^0(\Omega) := \{\Gamma(\gamma)_0^1 \mid \gamma \in \Pi(\Omega, x), \gamma \simeq 0\} \leq \text{Hol}_x(\Omega) \quad (1.79)$$

der Berry-Phasen, die durch nullhomotope Wege erhalten werden können. Beides sind Lie-Gruppen, insbesondere ist $\text{Hol}_x^0(\Omega)$ eine normale Untergruppe und diejenige Zusammenhangskomponente von $\text{Hol}_x(\Omega)$, die das neutrale Element enthält. Ähnlich wie auch bei der Fundamentalgruppe sind für verschiedene Punkte x, y die Holonomiegruppen als Untergruppen von $GL_d(\mathbb{C})$ zueinander konjugiert (wenn es einen Weg zwischen x, y gibt), d.h. für das Ermitteln der Gruppenstruktur ist der betrachtete Punkt irrelevant.

Lie-Gruppen lassen sich sehr gut über ihre Lie-Algebren charakterisieren, da es sich dabei um endlichdimensionale Vektorräume handelt. Insbesondere haben $\text{Hol}_x(\Omega)$ und $\text{Hol}_x^0(\Omega)$ *dieselbe* Lie Algebra.

Das Ambrose-Singer-Theorem [KN63, S. 89] besagt, dass die Lie-Algebra $\mathfrak{hol}_x(\Omega)$ der Holonomiegruppe in $x \in \Omega$ durch $R_x(\xi, \eta)$ erzeugt wird, wobei R die Krümmungsform ist und $\xi, \eta \in T_x\Omega$ sind.

Verschwindet die Krümmung überall, so folgt, dass $\mathfrak{hol}_x(\Omega)$ der Nullvektorraum ist. Insbesondere ist dann $\text{Hol}_x^0(\Omega)$ die triviale Gruppe. Ferner gibt es einen surjektiven Gruppenhomomorphismus

$$\pi_1(\Omega) \rightarrow \text{Hol}_x(\Omega) / \text{Hol}_x^0(\Omega), \quad (1.80)$$

denn nach Definition ist die Abbildung eines Wegs γ auf die durch diesen Weg erzeugte Berry-Phase surjektiv auf $\text{Hol}_x(\Omega)$, hängt (analog zu Abschnitt 1.4) nur von der Homotopieklasse des Weges ab und ist (ebenfalls analog) multiplikativ bei Konkatenation von Wegen. Nun wendet man den Homomorphiesatz an und erhält die behauptete Abbildung.

Strukturell können wir diesen Quotienten der Holonomiegruppen also als Quotientengruppe der Fundamentalgruppe $\pi_1(\Omega)$ auffassen. Das hat hier zur Folge, dass man die Holonomiegruppe als semidirektes Produkt einer (bekannten) Lie-Gruppe und einer diskreten Gruppe schreiben kann, die aber wiederum eine Quotientengruppe der Fundamentalgruppe $\pi_1(\Omega)$ ist.

Wir erhalten also insgesamt dieselben Resultate wie in Abschnitt 1.4: Verschwindet die Krümmung überall, so wird $\text{Hol}^0(\Omega)$ trivial. $\text{Hol}(\Omega)$ lässt sich dann als Quotient der Fundamentalgruppe auffassen, und insbesondere hängt

die Berry-Phase nur von der Homotopieklasse des Wegs ab. Ist obendrein die Fundamentalgruppe trivial, so gibt es keine Berry-Phase.

2 Exchange-only Qubits

Wir führen nun das quantenmechanische System (bzw. den Hilbertraum) ein, welches im Rest dieser Arbeit untersucht werden wird.

Dazu sei $\mathcal{H}_{1/2} (\cong \mathbb{C}^2)$ der Hilbertraum, der den Spin eines Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchens beschreibt. Wir betrachten ein System aus drei Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen, also den Hilbertraum

$$\mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2} \quad (2.1)$$

mit der Produktbasis aus $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ und finden die Eigenzustände des Gesamtspins, also die simultanen Eigenzustände von

$$S_3 = s_3 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes s_3 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes s_3 \quad (2.2)$$

und

$$\begin{aligned} S^2 = \frac{9\hbar^2}{4} & \mathbb{1} + s_+ \otimes s_- \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes s_+ \otimes s_- + s_- \otimes \mathbb{1} \otimes s_+ \\ & + s_- \otimes s_+ \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes s_- \otimes s_+ + s_+ \otimes \mathbb{1} \otimes s_- \\ & + 2s_3 \otimes s_3 \otimes \mathbb{1} + 2\mathbb{1} \otimes s_3 \otimes s_3 + 2s_3 \otimes \mathbb{1} \otimes s_3. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Hierbei bezeichnen die Großbuchstaben die Operatoren, die sich auf den Gesamtspin beziehen, und die Kleinbuchstaben die Operatoren, die sich auf die Einteilchenspins beziehen.

Die simultanen Eigenzustände von S^2, S_3 lauten

$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle &= |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle) \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, - \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle) \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, - \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, + \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - 2|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle) \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, + \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - 2|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Die drei Quantenzahlen sind Gesamtspinbetrag, Gesamtspin in z -Richtung und Parität bei Vertauschung von Teilchen 1 und 3 (bei Spinbetrag $\frac{3}{2}$ ist letztere nicht nötig, da sie alle symmetrisch sind).

Das exchange-only Qubit ist nun ein 2-dimensionaler (komplexer) Unterraum des Eigenraums mit Gesamtspin-Betrag $\frac{1}{2}$, z.B. der \mathbb{C} -span von

$$\begin{aligned} |0\rangle &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, - \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \\ |1\rangle &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, + \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - 2|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle). \end{aligned} \quad (2.5)$$

3 Nicht-entarteter Fall — Nur Austausch

Als einfachstes Beispiel betrachten wir den Fall, dass die drei Spins nur über Austauschwechselwirkung miteinander interagieren, genauer: Austauschwechselwirkung zwischen den Spins 1 und 2 sowie von 2 und 3.

Es sei an dieser Stelle schon einmal bemerkt, dass der Fall von drei Austauschwechselwirkungen völlig analog zum hier betrachteten verläuft und dieselben Ergebnisse liefert.

3.1 Beschreibung des Hamiltonoperators

Wir betrachten den Hamiltonoperator

$$H = -J_1 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 - J_2 \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 \quad (3.1)$$

(\mathbf{S}_i jeweils das Tupel der Spinoperatoren des i -ten Teilchens). Dieser kommutiert mit S^2, S_3 , d.h. die Energieeigenzustände sind auch Eigenzustände des Gesamtspins. Insbesondere heißt das, dass H den Unterraum $\mathcal{H} := \text{span}_{\mathbb{C}}(|0\rangle, |1\rangle)$ invariant lässt, weshalb wir fortan den „großen“ Vektorraum $\mathcal{H}_{1/2}^{\otimes 3}$ vergessen werden und H nur auf \mathcal{H} betrachten.

Insbesondere lässt sich zeigen, dass

$$\begin{aligned} H|0\rangle &= \frac{\sqrt{3}}{4} (J_1 - J_2) \hbar^2 |1\rangle \\ H|1\rangle &= \frac{\sqrt{3}}{4} (J_1 - J_2) \hbar^2 |0\rangle + \frac{1}{2} (J_1 + J_2) \hbar^2 |1\rangle \end{aligned} \quad (3.2)$$

d.h. mit der Qubit-Basis $|0\rangle, |1\rangle$ lässt sich H als Matrix darstellen:

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \beta \\ \beta & 2\alpha \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\alpha + \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (3.3)$$

mit den Pauli-Matrizen $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$, dem „Magnetfeld“ $\mathbf{B} = (\beta, 0, \alpha)$ und den neuen Parametern

$$\begin{aligned} \alpha &:= \frac{1}{2} (J_1 + J_2) \hbar^2 \\ \beta &:= \frac{\sqrt{3}}{2} (J_1 - J_2) \hbar^2. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Da es sich bei der Abbildung von (α, β) auf (J_1, J_2) um eine invertierbare lineare Abbildung handelt, ist sie glatt und invertierbar, stellt also eine Karte der (noch zu definierenden) Parametermannigfaltigkeit dar.

3.2 Diagonalisierung des Hamiltonoperators

Nun diagonalisieren wir H . Dazu überlegen wir uns zunächst, wie das charakteristische Polynom χ_H von H aussieht. Angenommen H hat die Eigenwerte λ_1, λ_2 . Dann ist

$$\chi_H = (t - \lambda_1)(t - \lambda_2) = t^2 - (\lambda_1 + \lambda_2)t + \lambda_1\lambda_2 = t^2 - \text{tr}(H)t + \det(H), \quad (3.5)$$

also

$$\lambda_{1/2} = \frac{\text{tr}(H)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\text{tr}(H)}{2}\right)^2 - \det(H)}. \quad (3.6)$$

Mit $\text{tr}(H) = \alpha$ und $\det(H) = \frac{1}{4}\beta^2$ lauten die Eigenwerte dann also

$$\lambda_{1/2} = \frac{1}{2} \left(\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \right). \quad (3.7)$$

Für die Berechnung der Berry-Phase ist es von elementarer Wichtigkeit, dass die Eigenwerte gleich-oft ausgeartet sind, d.h. wir müssen nun den Parameterraum $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$ so definieren, dass λ_1 und λ_2 entweder für alle (zulässigen) Parameter verschieden sind oder für alle Parameter gleich sind.

Falls sie gleich sein sollen, so ist Ω die Nullstellenmenge der Diskriminante des charakteristischen Polynoms, also die Nullstellenmenge eines Polynoms in zwei Variablen. Dann wäre (Krull'scher Hauptidealsatz oder Satz über lokale Auflösbarkeit) Ω 1-dimensional. In solchen Mannigfaltigkeiten gibt es aber keine Möglichkeit, Flächen einzuschließen, d.h. diesen Fall werden wir nicht weiter verfolgen.

Wenden wir uns also dem Fall $\lambda_1 \neq \lambda_2$ zu (dem nicht-entarteten Fall). Offenbar ist $\lambda_1 \neq \lambda_2$, wenn $\alpha^2 + \beta^2 \neq 0$, also wenn $(\alpha, \beta) \neq 0$. Das bedeutet aber auch, dass $(J_1, J_2) \neq 0$. Ω kann somit als $\mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$ gewählt werden. Definiere nun analog zu Beispiel 1.1.3 die Vektorbündel $\pi_i : E_i \rightarrow \Omega$ zum Hamiltonoperator H und den Eigenwerten λ_i ($i = 1, 2$).

Wir wollen nun die Eigenräume in Abhängigkeit von α, β bestimmen. Da bei dieser Berechnung sehr oft die Kombinationen

$$\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}, \quad \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}, \quad \frac{\beta}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \quad (3.8)$$

auftreten, werden wir noch einmal die Parametrisierung anpassen, indem wir

$$\alpha = R \sin(\theta), \quad \beta = R \cos(\theta) \quad (3.9)$$

setzen. Hierbei ist die Forderung $(J_1, J_2) \neq 0$ äquivalent zu $R > 0$. Die Abhängigkeit von α, β von R, θ ist zwar keine Karte, jedoch eine universelle Überdeckung, die lokal (glatt) umkehrbar ist, also lokal eine Karte definiert. Dies

hat zur Folge, dass wir auf die 2π -Periodizität in θ achten müssen, wenn wir Abbildungen auf ganz Ω durch Terme von R, θ definieren wollen.

In diesen Koordinaten formuliert hat H die Form

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & R \sin(\theta) \\ R \sin(\theta) & 2R \cos(\theta) \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

und die Eigenwerte

$$\lambda_{1/2} = \frac{R}{2} (\cos(\theta) \pm 1). \quad (3.11)$$

Unter Zuhilfenahme der Doppelwinkel-Identitäten der trigonometrischen Funktionen sieht man schnell, dass

$$\text{Eig}(H, \lambda_1) = \mathbb{C} \begin{pmatrix} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} =: \mathbb{C} \tilde{u}_1(R, \theta) \quad (3.12)$$

bzw.

$$\text{Eig}(H, \lambda_2) = \mathbb{C} \begin{pmatrix} -\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} =: \mathbb{C} \tilde{u}_2(R, \theta). \quad (3.13)$$

Damit die Funktionen $\tilde{u}_1, \tilde{u}_2 : \mathbb{R}_{>0} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}^2$ auf Ω (glatte) Funktionen induzieren, müssen sie wie eingangs schon erwähnt in θ 2π -periodisch sein.

Allerdings ist $\tilde{u}_j(R, 2\pi + \theta) = -\tilde{u}_j(R, \theta)$ ($j = 1, 2$), sodass diese Funktionen sich noch nicht auf Ω liften lassen. Nimmt man stattdessen

$$u_j(R, \theta) := \exp\left(-i \frac{\theta}{2}\right) \tilde{u}_j, \quad (3.14)$$

so erfüllen sie die erforderliche Periodizitätsbedingung, sind glatt und liegen immer noch im selben Eigenraum $\text{Eig}(H, \lambda_j)$ ($j = 1, 2$).

u_j definiert nun also jeweils eine globale Basis des Vektorbündels π_j . Da u_1, u_2 normiert sind, sind die Maßtensoren der beiden Bündel π_1, π_2 jeweils die konstante Funktion 1.

Nun wollen wir die Komponenten $A_{j,R}, A_{j,\theta}$ der Zusammenhangsform des Berry-Zusammenhangs auf dem Vektorbündel π_j bestimmen ($j = 1, 2$). Da weder u_1 noch u_2 explizit von R abhängen, ist $A_{1,R} = A_{2,R} = 0$. Für θ gilt:

$$\begin{aligned} \partial_\theta u_1(R, \theta) &= -\frac{i}{2} u_1(R, \theta) - \frac{1}{2} u_2(R, \theta) \\ \partial_\theta u_2(R, \theta) &= -\frac{i}{2} u_2(R, \theta) + \frac{1}{2} u_1(R, \theta). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Nach Lemma 1.3.7 ist $A_{j,\theta} = \langle u_i | \partial_\theta u_i \rangle$, also folgt, da u_1, u_2 immer orthogonal sind, dass

$$A_{j,\theta} = -\frac{i}{2} \quad (j = 1, 2). \quad (3.16)$$

Da dies jeweils eine Konstante ist, verschwindet die Krümmung.

3.3 Bestimmung der Berry-Phase für alle Wege

Da die Parametrisierung des Parameterraums lokal umkehrbar ist, definieren auch \tilde{u}_1, \tilde{u}_2 lokal Basen von π_1, π_2 , die rein reell sind. Somit verschwindet (wie eben erneut gezeigt) die Krümmung und es tritt der zweite Sonderfall aus Abschnitt 1.4 ein, d.h. die Berry-Phase hängt nur von der Homotopieklasse des durchlaufenen Weges ab. Die Fundamentalgruppe von Ω ist isomorph zu $(\mathbb{Z}, +)$, denn jede Homotopieklasse wird eindeutig (und gruppenstrukturertend) durch ihre Windungszahl um $(0, 0)$ charakterisiert. Es genügt also, die Berry-Phase für eine Kurve mit Windungszahl 1 zu berechnen, da die 1 die Gruppe \mathbb{Z} erzeugt, also diese Kurve die Fundamentalgruppe erzeugt.

Betrachte also die Kurve $\gamma : [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{R}_{>0} \times \mathbb{R}, t \mapsto (1, t)$ (wobei das die Werte von R, θ sind). Dies definiert eine geschlossene Kurve in Ω . Da u_1, u_2 bereits jeweils globale Basen sind, können wir gleich die Formel aus Lemma 1.3.5 verwenden und erhalten jeweils

$$\Gamma_j(\gamma)_0^t = \exp\left(-\frac{it}{2}\right) \quad (3.17)$$

für den Berry-Transport im Bündel π_j . Insbesondere heißt das, dass $\Gamma_j(\gamma)_0^{2\pi} = -1$ ist, also dass jeder Eigenzustand von H durch adiabatische Variation der Parameter eine Berry-Phase von π akquirieren kann. Dies ist jedoch nur für topologisch nichttriviale Wege möglich. Für einen beliebigen Weg γ akquiriert ein beliebiger Eigenzustand von H insbesondere die Berry-Phase

$$(-1)^{n(\gamma, 0)}, \quad (3.18)$$

wobei $n(\gamma, 0)$ die Windungszahl von γ um den Ursprung ist.

4 Entarteter Fall — Homogenes Magnetfeld

Aus den Überlegungen am Anfang des letzten Abschnitts können wir folgern, dass wir nur dann eine Entartung von H erhalten (die eine hinreichend interessante Parametermannigfaltigkeit ergibt), wenn H mehr als drei Parameter hat. Ferner folgt aus den Überlegungen in Abschnitt 1.3, dass sich nur dann eine Berry-Phase ergeben kann, wenn der Projektionsoperator auf den betrachteten Eigenraum parameterabhängig ist. In einem 2-dimensionalen Hilbertraum ist ein Projektor auf einen (mindestens) 2-dimensionalen Unterraum (den entarteten Eigenraum) allerdings immer die Identität, also insbesondere konstant.

Wir müssen also einen größeren Hilbertraum betrachten, und insbesondere gezielt versuchen, die S_z - oder die S^2 -Symmetrie zu brechen (soll heißen: H derart wählen, dass H mit einem der beiden Operatoren nicht mehr kommutiert). Wir betrachten hier den Fall, dass H nicht mit S_z kommutiert. Im Abschnitt danach werden wir uns dem anderen Fall zuwenden.

Wir betrachten den Fall, dass zum bisherigen Hamiltonoperator noch ein Magnetfeld in beliebiger Richtung hinzukommt, etwa

$$H = -J_1 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 - J_2 \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}. \quad (4.1)$$

4.1 Beschreibung des Hamiltonoperators

Durch die Aufgabe der S_z -Symmetrie müssen wir auf einen größeren Unterraum ausweichen. Da H immernoch mit S^2 kommutiert, wählen wir den gesamten Unterraum mit Gesamtspin-Betrag $\frac{1}{2}$, d.h. zu unseren beiden bisher betrachteten Qubit-Zuständen kommen zwei Leck-Zustände hinzu. Der Frage, welche Zustände hier dann günstigerweise die Namen $|0\rangle$ und $|1\rangle$ tragen sollen, werden wir uns allerdings erst später zuwenden.

In der Basis

$$\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, - \right\rangle, \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, - \right\rangle, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, + \right\rangle, \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, + \right\rangle \quad (4.2)$$

hat H die Matrix-Darstellung

$$H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -B_3\hbar & (B_1 + iB_2)\hbar & -\frac{\sqrt{3}}{2}(J_1 - J_2)\hbar^2 & 0 \\ (B_1 - iB_2)\hbar & B_3\hbar & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}(J_1 - J_2)\hbar^2 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}(J_1 - J_2)\hbar^2 & 0 & (J_1 + J_2)\hbar^2 - B_3\hbar & -(B_1 + iB_2)\hbar \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}(J_1 - J_2)\hbar^2 & -(B_1 - iB_2)\hbar & (J_1 + J_2)\hbar^2 + B_3\hbar \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

Mit den im letzten Kapitel bereits verwendeten Parametern

$$\alpha := \frac{1}{2}(J_1 + J_2)\hbar^2, \quad \beta := \frac{\sqrt{3}}{2}(J_1 - J_2)\hbar^2 \quad (4.4)$$

sowie den beiden neuen Parametern $\gamma := (B_1 - iB_2)\hbar, \delta := B_3\hbar$ nimmt H die Form

$$H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\delta & \bar{\gamma} & -\beta & 0 \\ \gamma & \delta & 0 & \beta \\ -\beta & 0 & 2\alpha - \delta & -\bar{\gamma} \\ 0 & \beta & -\gamma & 2\alpha + \delta \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

an.

4.2 Finden der Parametermannigfaltigkeit Ω

Betrachten wir statt H die Matrix $H' := H - \frac{1}{4}\text{tr}(H)$, so erhalten wir das charakteristische Polynom

$$16\lambda^4 - 8(\alpha^2 + \beta^2 + |\gamma|^2 + \delta^2)\lambda^2 + \alpha^4 + \beta^4 + |\gamma|^4 + \delta^4 + 2\alpha^2\beta^2 - 2\alpha^2|\gamma|^2 - 2\alpha^2\delta^2 - 2\beta^2|\gamma|^2 - 2\beta^2\delta^2 + 2|\gamma|^2\delta^2 \quad (4.6)$$

mit den Nullstellen

$$\pm \frac{1}{2} \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + |\gamma|^2 + \delta^2 \pm 2\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \sqrt{|\gamma|^2 + \delta^2}} \quad (4.7)$$

(wobei die \pm 's unabhängig voneinander sind). Addition von $\frac{1}{4}\text{tr}(H) = \frac{1}{2}\alpha$ ergibt die Eigenwerte von H .

Wir suchen nun nach Bedingungen, dass zwei Eigenwerte gleich sind.

Die Gleichheit zweier Eigenwerte resultiert meist darin, dass $\alpha = \beta = \gamma = \delta = 0$. Dann sind aber *alle* Eigenwerte ausgeartet und es würde keine Berry-Phase zustandekommen.

Es gibt jedoch eine Möglichkeit, zwei Eigenwerte gleichzusetzen, nämlich

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \left(\alpha + \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + |\gamma|^2 + \delta^2 - 2\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \sqrt{|\gamma|^2 + \delta^2}} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\alpha - \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + |\gamma|^2 + \delta^2 - 2\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} \sqrt{|\gamma|^2 + \delta^2}} \right). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Dazu muss der Ausdruck in der (äußeren) Wurzel verschwinden, sodass beide Eigenwerte den Wert $\frac{1}{2}\alpha$ annehmen. Dass der Ausdruck in der Wurzel verschwindet, ist äquivalent zu

$$\alpha^2 + \beta^2 - |\gamma|^2 - \delta^2 = 0. \quad (4.9)$$

Unsere Parametermannigfaltigkeit Ω definieren wir als

$$\Omega := \left\{ (\alpha, \beta, \gamma, \delta) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{C} \times \mathbb{R} \mid \alpha^2 + \beta^2 = |\gamma|^2 + \delta^2 > 0 \right\}, \quad (4.10)$$

die Menge der Parameterwerte, für die $\frac{1}{2}\alpha$ ein doppelt ausgearteter Eigenwert von H ist.

4.3 Definition der richtigen Karten auf Ω

Ω ist vermöge der Abbildung

$$(\alpha, \beta, \gamma, \delta) \mapsto \left(\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}, \frac{(\alpha, \beta)}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}, \frac{(\operatorname{Re}(\gamma), \operatorname{Im}(\gamma), \delta)}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \right) \quad (4.11)$$

diffeomorph zu $\mathbb{R}_{>0} \times S^1 \times S^2$ (S^n die n -Sphäre), besitzt also keine globale Karte (Satz vom Igel). Deshalb müssen wir uns vorher überlegen, von welchen Regionen wir eine Karte benötigen.

Da wir letztlich ermitteln wollen, welche Transformationen von exchange-only Qubits in der Holonomiegruppe des Berry-Zusammenhangs (in einem bestimmten Punkt in Ω) liegen, gehen wir zunächst der Frage nach, für welche Parameterwerte die „reinen“ exchange-only Qubit-Zustände überhaupt im Ei-

genraum von H zu $\frac{1}{2}\alpha$ liegen. Es gilt

$$\begin{aligned}
(H - \frac{1}{2}\alpha) \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, - \right\rangle &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\alpha - \delta \\ \gamma \\ -\beta \\ 0 \end{pmatrix} \\
(H - \frac{1}{2}\alpha) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, - \right\rangle &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \bar{\gamma} \\ -\alpha + \delta \\ 0 \\ \beta \end{pmatrix} \\
(H - \frac{1}{2}\alpha) \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, + \right\rangle &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\beta \\ 0 \\ \alpha - \delta \\ -\bar{\gamma} \end{pmatrix} \\
(H - \frac{1}{2}\alpha) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, + \right\rangle &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ \beta \\ -\bar{\gamma} \\ \alpha + \delta \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Damit diese Vektoren verschwinden, muss $\beta = \gamma = 0$. Ferner muss im ersten und vierten Fall $\alpha + \delta = 0$ bzw. im zweiten und dritten Fall $\alpha - \delta = 0$. Da nicht beides gleichzeitig der Fall sein kann (sonst $\alpha = \beta = \gamma = \delta = 0$), müssen wir als Qubit-Zustände nun andere Zustände wählen als im letzten Kapitel. Hier wählen wir

$$|0\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, - \right\rangle, \quad |1\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, + \right\rangle. \tag{4.13}$$

Da die Kugel, auf der sich der Magnetfeldvektor bewegt, bequemerweise durch Kugelkoordinaten parametrisiert wird, werden wir Zusammenhangsform und Krümmungsform in einer Karte berechnen, die (γ, β) mit Kugelkoordinaten parametrisiert. Kugelkoordinaten sind allerdings nur dann wohldefiniert, wenn $\gamma \neq 0$, was genau in unserem Ausgangspunkt nicht erfüllt ist. Da es sich mit den Kugelkoordinaten jedoch einfacher rechnen lässt, werden wir mittels der in Abschnitt 1.5 vorgestellten Methode die Holonomiegruppe in einem Punkt mit $\gamma \neq 0$ untersuchen und sie dann mit einer Kurve auf den Punkt $\lambda_1 := \hbar^2 B(1, 0, 0, -1)$ transportieren.

Wir definieren dazu die Karten $(\Omega_1, \phi_1), (\Omega_2, \phi_2)$ auf den Mengen

$$\begin{aligned}
\Omega_1 &= \{(\alpha, \beta, \gamma, \delta) \in \Omega \mid \delta < 0, \alpha - \delta \neq 0\} \quad \text{und} \\
\Omega_2 &= \{(\alpha, \beta, \gamma, \delta) \in \Omega \mid \gamma \neq 0\}
\end{aligned} \tag{4.14}$$

durch

$$\begin{aligned}
\phi_1^{-1}(\psi, \xi, \eta, B) &:= \hbar^2 B(\sin(\psi), \cos(\psi), \xi + i\eta, -\sqrt{1 - \xi^2 - \eta^2}) \quad \text{und} \\
\phi_2^{-1}(\psi, \theta, \phi, B) &:= \hbar^2 B(\sin(\psi), \cos(\psi), \sin(\theta) \exp(-i\phi), \cos(\theta))
\end{aligned} \tag{4.15}$$

(wobei auf der rechten Seite jeweils $(\alpha, \beta, \gamma, \delta)$ stehen).

4.4 Beschreibung der Karte (Ω_2, ϕ_2)

Wir wenden uns zunächst der Karte (Ω_2, ϕ_2) zu. Unter der Annahme $\gamma \neq 0$ spannen folgende Vektoren den Kern von $H - \frac{1}{2}\alpha$ auf:

$$\begin{aligned} v_1 &= \begin{pmatrix} \alpha - \delta \\ \gamma \\ \beta \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar^2 B \begin{pmatrix} \sin(\psi) - \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \exp(-i\phi) \\ \cos(\psi) \\ 0 \end{pmatrix} \\ v_2 &= \begin{pmatrix} -\beta \\ 0 \\ \alpha + \delta \\ \gamma \end{pmatrix} = \hbar^2 B \begin{pmatrix} -\cos(\psi) \\ 0 \\ \sin(\psi) + \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \exp(-i\phi) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Ähnlich zum vorherigen Kapitel bestimmen wir nun den metrischen Tensor g mit $g_{ij} = \langle v_i | v_j \rangle$ dieser Basis und sein Inverses:

$$\begin{aligned} g &= 2 \begin{pmatrix} \alpha^2 + \beta^2 - \alpha\delta & \beta\delta \\ \beta\delta & \alpha^2 + \beta^2 + \alpha\delta \end{pmatrix} \\ g^{-1} &= \frac{1}{2\hbar^4 B^2 \sin^2(\theta)} \begin{pmatrix} 1 + \cos(\theta) \sin(\psi) & -\cos(\theta) \cos(\psi) \\ -\cos(\theta) \cos(\psi) & 1 - \cos(\theta) \sin(\psi) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Hierbei wurde auf eine Darstellung von g in lokalen Koordinaten (ψ, θ, ϕ, B) verzichtet. Mit $\tilde{A}_{ijk} = \langle v_j | \partial_i v_k \rangle$ und g^{-1} lassen sich die Zusammenhangsformen A_i berechnen. Sie lauten folgendermaßen:

$$\begin{aligned} A_\psi &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\ A_\theta &= -\frac{1}{2\sin(\theta)} \begin{pmatrix} -\sin(\psi) - \cos(\theta) & \cos(\psi) \\ \cos(\psi) & \sin(\psi) - \cos(\theta) \end{pmatrix} \\ A_\phi &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos(\theta) \sin(\psi) & -\cos(\theta) \cos(\psi) \\ -\cos(\theta) \cos(\psi) & 1 - \cos(\theta) \sin(\psi) \end{pmatrix} \\ A_B &= \frac{1}{B} \mathbb{1}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Nun ist auch noch die Krümmungsform $R_{ij} = \partial_i A_j - \partial_j A_i + [A_i, A_j]$ von Interesse. Offenbar sind die Zusammenhangsformen der Winkelvariablen unabhängig von B , ebenso wie A_B unabhängig von den Winkelvariablen ist. Dies hat zur Folge, dass jede Komponente der Form R_{Bi} oder R_{iB} ($i = \psi, \theta, \phi$) verschwindet. Wegen der Antisymmetrie der Krümmungsform reduziert sich die Berechnung der Krümmungsform auf die Berechnung der drei Komponenten $R_{\psi\theta}, R_{\psi\phi}, R_{\theta\phi}$. Die ersten beiden verschwinden überall, jedoch nicht die letzte. Sie lautet

$$R_{\theta\phi} = \frac{-i}{2} \sin(\theta) \begin{pmatrix} -\sin(\psi) & \cos(\psi) \\ \cos(\psi) & \sin(\psi) \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

4.5 Bestimmung der Holonomiegruppe in der Karte (Ω_2, ϕ_2)

Nach dem in Abschnitt 1.5 erwähnten Ambrose-Singer-Theorem wird die Lie-Algebra der Holonomiegruppe $\text{Hol}_{\phi_2^{-1}(\psi, \theta, \phi, B)}(\Omega)$ durch diese Matrix erzeugt.

Wir suchen uns nun einen Punkt aus, für den diese Matrix eine besonders einfache Form annimmt, etwa $\lambda_2 := \phi_2^{-1}(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, 0, B) = \hbar^2 B(1, 0, 1, 0)$. Dort ist

$$\mathfrak{hol}_{\lambda_2}(\Omega) = \text{span}_{\mathbb{R}} \left(\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right). \quad (4.20)$$

Das bedeutet, die beschränkte Holonomiegruppe in λ_2 ist die Ein-Parameter-Gruppe

$$\left\{ \begin{pmatrix} \exp(it) & 0 \\ 0 & \exp(-it) \end{pmatrix} \mid t \in \mathbb{R} \right\}. \quad (4.21)$$

Dies lässt sich sehr gut mit dem System von einem Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen in einem beliebig ausgerichteten Magnetfeld vergleichen, für das bereits in [Ber84] die Existenz einer Berry-Phase nachgewiesen wurde. Dort rührt diese Phase ebenfalls daher, dass die Krümmungskomponente $R_{\theta\phi}$ nicht verschwindet (wobei das Magnetfeld in Kugelkoordinaten parametrisiert wurde). Im Vergleich zu dort ist es hier jedoch möglich, dass die beiden Zustände, die den doppelt entarteten Eigenraum aufspannen, verschiedene Berry-Phasen akkumulieren.

Mithilfe des Epimorphismus $\pi_1(\Omega) \rightarrow \text{Hol}_{\lambda_2}(\Omega) / \text{Hol}_{\lambda_2}^0(\Omega)$ aus Abschnitt 1.5 ermitteln wir nun die Struktur des Quotienten der Holonomiegruppen.

Wie bereits erwähnt wurde, ist Ω diffeomorph zu $\mathbb{R}_{>0} \times S^1 \times S^2$. Da S^2 und $\mathbb{R}_{>0}$ jeweils einfach zusammenhängend sind, hat Ω dieselbe Fundamentalgruppe wie S^1 (vgl. auch mit dem letzten Kapitel), nämlich (bis auf Isomorphie) $(\mathbb{Z}, +)$, welche hier von dem Weg erzeugt wird, der einmal den Parameter ψ abfährt.

Betrachte den Weg $\gamma : [0, 1] \rightarrow \Omega, t \mapsto \hbar^2 B(\sin(2\pi t), \cos(2\pi t), 1, 0)$, also mit

$$\phi_2(\gamma(t)) = \left(2\pi t, \frac{\pi}{2}, 0, B \right). \quad (4.22)$$

Nach Satz 1.3.5 hat der parallele Transport die Form

$$\begin{aligned} \mathcal{T} \exp \left(- \int_{\gamma} \sum_{x \in \{\phi, \theta, \phi, B\}} A_x dx \right) &= \mathcal{T} \exp \left(- 2\pi \int_0^1 A_{\psi}(\gamma(t)) dt \right) \\ &= \exp \left(- \pi \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \right) \\ &= -\mathbb{1}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Ebenso wie im letzten Kapitel wird auf diesem Weg eine globale Berry-Phase von π akquiriert. Da diese Matrix bereits ein Element von $\text{Hol}_{\lambda_2}^0(\Omega)$ ist, besteht kein Unterschied zwischen $\text{Hol}_{\lambda_2}(\Omega)$ und $\text{Hol}_{\lambda_2}^0(\Omega)$.

4.6 Beschreibung der Karte (Ω_1, ϕ_1)

Als nächstes betrachten wir die Karte (Ω_1, ϕ_1) , für die wir abermals eine lokale Basis finden und deren metrischen Tensor und Zusammenhangsform berechnen.

Unter der Annahme $\alpha - \delta \neq 0$ wird der Kern von $H - \frac{1}{2}\alpha$ aufgespannt durch die beiden Vektoren

$$\begin{aligned} u_1 &= \begin{pmatrix} \alpha - \delta \\ \gamma \\ \beta \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar^2 B \begin{pmatrix} \sin(\psi) + \sqrt{1 - \xi^2 - \eta^2} \\ \xi + i\eta \\ \cos(\psi) \\ 0 \end{pmatrix} \\ u_2 &= \begin{pmatrix} 0 \\ \beta \\ \bar{\gamma} \\ \alpha - \delta \end{pmatrix} = \hbar^2 B \begin{pmatrix} 0 \\ \cos(\psi) \\ \xi - i\eta \\ \sin(\psi) + \sqrt{1 - \xi^2 - \eta^2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Der metrische Tensor und sein Inverses ergeben sich zu

$$\begin{aligned} g &= 2 \begin{pmatrix} \alpha^2 + \beta^2 + \alpha\delta & \beta\bar{\gamma} \\ \beta\gamma & \alpha^2 + \beta^2 + \alpha\delta \end{pmatrix} \\ g^{-1} &= \frac{2\varepsilon^2(1 - \xi^2 - \eta^2)}{\hbar^4 B^2} \begin{pmatrix} 1 + \sin(\psi)\sqrt{1 - \xi^2 - \eta^2} & -(\xi - i\eta)\cos(\psi) \\ -(\xi + i\eta)\cos(\psi) & 1 + \sin(\psi)\sqrt{1 - \xi^2 - \eta^2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.25)$$

und die Zusammenhangsformen lauten

$$\begin{aligned} A_\psi &= \sqrt{1 - \xi^2 - \eta^2} \varepsilon \begin{pmatrix} \cos(\psi) & -(\xi - i\eta) \\ -(\xi + i\eta) & \cos(\psi) \end{pmatrix} \\ A_\xi &= \varepsilon \begin{pmatrix} -\xi - i\eta \sin(\psi)\sqrt{1 - \xi^2 - \eta^2} & \cos(\psi)(1 - \eta^2 - i\xi\eta) \\ \cos(\psi)(1 - \eta^2 + i\xi\eta) & -\xi + i\eta \sin(\psi)\sqrt{1 - \xi^2 - \eta^2} \end{pmatrix} \\ A_\eta &= \varepsilon \begin{pmatrix} -\eta + i\xi \sin(\psi)\sqrt{1 - \xi^2 - \eta^2} & \cos(\psi)(\xi\eta - i + i\xi^2) \\ \cos(\psi)(\xi\eta + i - i\xi^2) & -\eta - i\xi \sin(\psi)\sqrt{1 - \xi^2 - \eta^2} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.26)$$

wobei jeweils

$$\varepsilon = \frac{1}{2\sqrt{1 - \xi^2 - \eta^2}(\sqrt{1 - \xi^2 - \eta^2} + \sin(\psi))}. \quad (4.27)$$

4.7 Transfer der Holonomiegruppe auf Qubit-Zustände

Nun wollen wir ermitteln, wie sich hieraus die Holonomiegruppe im Punkt λ_1 ergibt, also wie sich die „reinen“ Qubit-Zustände $|0\rangle, |1\rangle$ (in λ_2) mittels Berry-Phasen transformieren lassen. Dazu transportieren wir den Anfangszustand in der Karte (Ω_1, ϕ_1) von λ_1 nach $\lambda_3 := \hbar^2 B\left(1, 0, \frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right)$, wechseln dort von der Basis $\mathcal{B} := (u_1(\lambda_3), u_2(\lambda_3))$ in die Basis $\mathcal{C} := (v_1(\lambda_3), v_2(\lambda_3))$, transportieren den Zustand in der Karte (Ω_2, ϕ_2) von λ_3 nach λ_2 , führen dort eine beliebige

Transformation aus der Holonomiegruppe durch, und führen anschließend alle bisherigen Schritte rückwärts durch.

Dazu definieren wir die Kurven

$$\begin{aligned}\chi_1 : [0, 1] &\rightarrow \Omega, t \mapsto \hbar^2 B \left(1, 0, \frac{t}{2}, -\sqrt{1 - \frac{t^2}{4}} \right) \\ \chi_2 : [0, 1] &\rightarrow \Omega, t \mapsto \hbar^2 B \left(1, 0, \sin\left(\frac{(5-2t)\pi}{6}\right), \cos\left(\frac{(5-2t)\pi}{6}\right) \right).\end{aligned}\tag{4.28}$$

Dies sind glatte Kurven mit $\chi_1(0) = \lambda_1$, $\chi_1(1) = \chi_2(0) = \lambda_3$ und $\chi_2(1) = \lambda_2$, wobei das Bild von χ_1 in Ω_1 und das Bild von χ_2 in Ω_2 liegt. Diese Kurven sind geeignet für die oben skizzierte Vorgehensweise.

Wir können die Holonomiegruppe in λ_1 nun schreiben als

$$\text{Hol}_{\lambda_1}(\Omega) = \Gamma(\chi_1)_1^0 T_{\mathcal{C}}^{\mathcal{B}} \Gamma(\chi_2)_1^0 \text{Hol}_{\lambda_2}(\Omega) \gamma(\chi_2)_0^1 T_{\mathcal{B}}^{\mathcal{C}} \Gamma(\chi_1)_0^1, \tag{4.29}$$

wobei $T_{\mathcal{B}}^{\mathcal{C}}, T_{\mathcal{C}}^{\mathcal{B}}$ jeweils die Basiswechselmatrizen von \mathcal{B} nach \mathcal{C} (bzw. umgekehrt) sind.

Die Basiswechselmatrizen sind auch die ersten Matrizen dieser Gleichung, die wir uns vornehmen werden. Im Punkt λ_3 haben die beiden Basen die folgende Form:

$$\begin{aligned}u_1 &= \frac{\hbar^2 B}{2} \begin{pmatrix} 2 + \sqrt{3} \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & u_2 &= \frac{\hbar^2 B}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 2 + \sqrt{3} \end{pmatrix} \\ v_1 &= \frac{\hbar^2 B}{2} \begin{pmatrix} 2 + \sqrt{3} \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & v_2 &= \frac{\hbar^2 B}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 - \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{4.30}$$

Offenbar ist $u_1 = v_1$ und $u_2 = (2 + \sqrt{3})v_2$. D.h. die Basiswechselmatrizen haben die Form

$$T_{\mathcal{B}}^{\mathcal{C}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 + \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad T_{\mathcal{C}}^{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 - \sqrt{3} \end{pmatrix}. \tag{4.31}$$

Die Berechnung von $\Gamma(\chi_1), \Gamma(\chi_2)$ müssen wir in den entsprechenden Karten vornehmen, d.h. wir untersuchen zunächst, welchen Kartenparametern die Kurven ϕ_1, ϕ_2 entsprechen:

$$\begin{aligned}\phi_1(\chi_1(t)) &= \left(\frac{\pi}{2}, \frac{t}{2}, 0, B \right) \\ \phi_2(\chi_2(t)) &= \left(\frac{\pi}{2}, 0, \frac{(5-2t)\pi}{6}, B \right).\end{aligned}\tag{4.32}$$

Die parallelen Transporte ergeben sich nun zu

$$\begin{aligned}
\Gamma(\chi_1)_0^1 &= \mathcal{T} \exp \left(-\frac{1}{2} \int_0^1 A_\xi(\gamma(t)) dt \right) \\
&= \mathcal{T} \exp \left(-\int_0^1 \frac{1}{4-t^2+2\sqrt{4-t^2}} \begin{pmatrix} -\frac{t}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{t}{2} \end{pmatrix} dt \right) \\
&= \exp \left(\int_0^1 \frac{t}{8-2t^2+4\sqrt{4-t^2}} dt \right) \mathbb{1} = \exp \left(\frac{1}{2} \ln \left(\frac{4}{\sqrt{3}+2} \right) \mathbb{1} \right) \\
&= \frac{2}{\sqrt{2+\sqrt{3}}} = 2\sqrt{2-\sqrt{3}} \mathbb{1}
\end{aligned} \tag{4.33}$$

und

$$\begin{aligned}
\Gamma(\chi_2)_0^1 &= \mathcal{T} \exp \left(\frac{\pi}{3} \int_0^1 -\frac{1}{2 \sin \left(\frac{(5-2t)\pi}{6} \right)} \begin{pmatrix} -1 - \cos \left(\frac{(5-2t)\pi}{6} \right) & 0 \\ 0 & 1 - \cos \left(\frac{(5-2t)\pi}{6} \right) \end{pmatrix} dt \right) \\
&= \exp \left(-\int_{\frac{5\pi}{6}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{2 \sin(\theta)} \begin{pmatrix} \cos(\theta) + 1 & 0 \\ 0 & \cos(\theta) - 1 \end{pmatrix} d\theta \right) \\
&= \exp \left(-\frac{1}{2} \int_{\frac{5\pi}{6}}^{\frac{\pi}{2}} \begin{pmatrix} \frac{\sin(\theta)}{1-\cos(\theta)} & 0 \\ 0 & \frac{-\sin(\theta)}{1+\cos(\theta)} \end{pmatrix} d\theta \right) \\
&= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2(2-\sqrt{3})}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2(2+\sqrt{3})}} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.34}$$

Da alle Matrizen, die in Gleichung 4.29 vorkommen, Diagonalmatrizen sind, die miteinander kommutieren, heben sich $\Gamma(\chi_{1/2})_0^1, \Gamma(\chi_{1/2})_1^0$ sowie die Basiswechselmatrizen gegenseitig auf, sodass $\text{Hol}_{\lambda_1}(\Omega)$ ebenfalls die Ein-Parameter-Gruppe

$$\left\{ \begin{pmatrix} \exp(it) & 0 \\ 0 & \exp(-it) \end{pmatrix} \mid t \in \mathbb{R} \right\} \tag{4.35}$$

ist, wobei dies die Matrixdarstellung in der Basis $(u_1(\lambda_1), u_2(\lambda_1))$ ist. Da diese Basis lediglich eine (gleichmäßig) skalierte Version von $(|0\rangle, |1\rangle)$ ist, ist dies auch die Darstellung in unserer Basis reiner Qubit-Zustände.

Wir sehen also, dass mithilfe von Berry-Phasen Phasengatter mit beliebiger Phase realisiert werden können.

5 Entarteter Fall — Inhomogenes Magnetfeld

Nun betrachten wir einen Hamiltonoperator bestehend aus drei Austauschwechselwirkungen zwischen den Spins und einem inhomogenen Magnetfeld in z -Richtung, das nur am zweiten Spin angreift. Der Hamiltonoperator hat somit die Form

$$H = -J_1 \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 - J_2 \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_1 - J_3 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + B_z S_{2,z}. \quad (5.1)$$

Dieser Operator kommutiert mit S_z , erhält also die Spinprojektion in z -Richtung. D.h. zu unseren beiden Qubit-Zuständen

$$|0\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, - \right\rangle \quad \text{und} \quad |1\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, + \right\rangle \quad (5.2)$$

kommt noch ein Leck-Zustand $|e\rangle = \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$ hinzu.

Unter Verwendung der vier Parameter

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\hbar^2}{2} (J_1 + J_2 + J_3) & \beta &= \frac{\sqrt{3} \hbar^3}{2} (J_1 - J_3) \\ \gamma &= -\frac{\hbar^2}{2} J_1 + \hbar^2 J_2 - \frac{\hbar^2}{2} J_3 & \delta &= \frac{\hbar}{3} B_z \end{aligned} \quad (5.3)$$

ergibt sich in der Basis $|e\rangle, |0\rangle, |1\rangle$ ausgedrückt folgende Matrixdarstellung von H :

$$H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\alpha - \delta & 0 & -2\sqrt{2}\delta \\ 0 & \alpha + \gamma - 3\delta & -\beta \\ -2\sqrt{2}\delta & -\beta & \alpha - \gamma + \delta \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

Diese Matrix hat ein sehr langes charakteristisches Polynom, sodass es nicht sinnvoll ist, hier exakt weiterzurechnen. Stattdessen werden wir uns zweier verschiedener Näherungsverfahren bedienen, wobei wir $\delta \ll \alpha$ annehmen, also einen gegenüber der Austauschwechselwirkung sehr kleinen Magnetfeldgradienten.

5.1 Störungstheorie

Wir zerlegen H hier folgendermaßen:

$$H = H_0 + V := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\alpha & 0 & 0 \\ 0 & \alpha + \gamma & -\beta \\ 0 & -\beta & \alpha - \gamma \end{pmatrix} + \delta \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & -\frac{3}{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (5.5)$$

Die Eigenwerte von H_0 lauten

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^{(0)} &= -\frac{\alpha}{2} \\ \varepsilon_2^{(0)} &= \frac{1}{2} (\alpha + \sqrt{\beta^2 + \gamma^2}) \\ \varepsilon_3^{(0)} &= \frac{1}{2} (\alpha - \sqrt{\beta^2 + \gamma^2}). \end{aligned} \quad (5.6)$$

Da im Folgenden sonst sehr oft die Kombinationen

$$\sqrt{\beta^2 + \gamma^2}, \quad \frac{\beta}{\sqrt{\beta^2 + \gamma^2}}, \quad \frac{\gamma}{\sqrt{\beta^2 + \gamma^2}} \quad (5.7)$$

auftreten würden, werden wir den Satz der zugrundeliegenden Parameter noch ein letztes Mal modifizieren, und setzen

$$\beta = R \sin \theta \quad \gamma = R \cos \theta. \quad (5.8)$$

Hierbei können wir von $R > 0$ ausgehen. Andernfalls sind $\mathbb{C}|0\rangle$ und $\mathbb{C}|e\rangle + \mathbb{C}|1\rangle$ invariante Unterräume von H , und es tritt keine Berry-Phase auf (was man durch Nachrechnen sieht).

Die Eigenvektoren von H_0 lauten

$$\begin{aligned} \psi_1^{(0)} &= |e\rangle \\ \psi_2^{(0)} &= \exp\left(-i\frac{\theta}{2}\right) \left(-\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle\right) \\ \psi_3^{(0)} &= \exp\left(-i\frac{\theta}{2}\right) \left(\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle\right). \end{aligned} \quad (5.9)$$

Der Vorfaktor von $\psi_2^{(0)}$ und $\psi_3^{(0)}$ wurde dabei so gewählt, dass die beiden Vektoren ebenso wie der Hamiltonoperator in θ 2π -periodisch sind.

In erster Ordnung ergeben sich folgende Korrekturen der Eigenwerte:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^{(1)} &= -\frac{\delta}{2} \\ \varepsilon_2^{(1)} &= -\frac{\delta}{2} - \delta \cos(\theta) \\ \varepsilon_3^{(1)} &= -\frac{\delta}{2} + \delta \cos(\theta). \end{aligned} \quad (5.10)$$

Wir wollen nun wieder eine zweifache Entartung erzeugen, insbesondere wollen wir, dass der zweite und dritte Eigenwert gleich sind, denn dann befinden sich die (störungstheoretisch korrigierten Versionen der) Qubit-Basisvektoren $|0\rangle, |1\rangle$ in diesem entarteten Eigenraum, sodass wir mit eventuell entstehenden Berry-Phasen Quantengatter zwischen diesen Zuständen realisieren können.

Aus der Forderung $\varepsilon_2^{(0)} + \varepsilon_2^{(1)} = \varepsilon_3^{(0)} + \varepsilon_3^{(1)}$ folgt, dass $R = 2\delta \cos(\theta)$, insbesondere ist also R auch sehr klein im Vergleich zu α . Die störungstheoretischen ersten Korrekturen der beiden Eigenvektoren in $\mathbb{C}|0\rangle + \mathbb{C}|1\rangle$ lauten

$$\begin{aligned} \psi_2^{(1)} &= \frac{-\sqrt{2}\delta \exp(-i\frac{\theta}{2})}{\alpha - \delta \cos(\theta)} \psi_1^{(0)} + \frac{2\delta \sin(\frac{\theta}{2}) \cos(\frac{\theta}{2})}{2\delta \cos(\theta)} \psi_3^{(0)} \\ \psi_3^{(1)} &= \frac{-\sqrt{2}\delta \exp(-i\frac{\theta}{2})}{\alpha + \delta \cos(\theta)} \psi_1^{(0)} + \frac{2\delta \sin(\frac{\theta}{2}) \cos(\frac{\theta}{2})}{-2\delta \cos(\theta)} \psi_2^{(0)}, \end{aligned} \quad (5.11)$$

sodass die korrigierten Eigenvektoren lauten:

$$\begin{aligned}
|0'\rangle &:= \psi_2^{(0+1)} = \exp\left(-i\frac{\theta}{2}\right) \begin{pmatrix} \frac{-\sqrt{2}\delta \sin(\frac{\theta}{2})}{\alpha + \delta \cos(\theta)} \\ \cos(\frac{\theta}{2}) \left(\frac{\sin^2(\frac{\theta}{2})}{\cos(\theta)} - 1 \right) \\ \sin(\frac{\theta}{2}) \left(\frac{\cos^2(\frac{\theta}{2})}{\cos(\theta)} + 1 \right) \end{pmatrix} \\
|1'\rangle &:= \psi_3^{(0+1)} = \exp\left(-i\frac{\theta}{2}\right) \begin{pmatrix} \frac{-\sqrt{2}\delta \sin(\frac{\theta}{2})}{\alpha - \delta \cos(\theta)} \\ \sin(\frac{\theta}{2}) \left(1 + \frac{\cos^2(\frac{\theta}{2})}{\cos(\theta)} \right) \\ \cos(\frac{\theta}{2}) \left(1 - \frac{\sin^2(\frac{\theta}{2})}{\cos(\theta)} \right) \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{5.12}$$

Mit diesen Vektoren lassen sich nun wie in den vorherigen Abschnitten die Zusammenhangs- und Krümmungsformen des Berry-Zusammenhangs bestimmen. Aufgrund der Komplexität der Ausdrücke wurde dies computergestützt getan und anschließend als Potenzreihe in δ entwickelt. Da wir bisher nur Störungstheorie in erster Ordnung betrieben haben, sind nur Ausdrücke bis $\mathcal{O}(\delta)$ interessant.

Uns interessieren hier nur Phänomene, die nicht mit Skalierung zusammenhängen, sodass nur die antihermiteschen Anteile der Komponenten R_{ij} der Krümmungsform relevant sind.

Es gilt

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}(R_{\alpha\theta} - R_{\alpha\theta}^*) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\delta^2) \\
\frac{1}{2}(R_{\alpha\theta} - R_{\alpha\theta}^*) &= \frac{2\delta}{\alpha^2} \frac{\cos^2(\theta)(3\cos^2(\theta) + 5)(1 - \cos(\theta))}{(\sin^2(\theta) + 4\cos^2(\theta))^2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\delta^2) \\
\frac{1}{2}(R_{\delta\theta} - R_{\delta\theta}^*) &= \frac{4\delta}{\alpha^2} \frac{\cos^2(\theta)(3\cos^2(\theta) + 5)(1 - \cos(\theta))}{(\sin^2(\theta) + 4\cos^2(\theta))^2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\delta^2).
\end{aligned} \tag{5.13}$$

Es ist somit möglich, eine nichttriviale Berry-Phase zu akquirieren, die einer Rotation zwischen $|0'\rangle$ und $|1'\rangle$ entspricht. Jedoch ist es dafür notwendig, δ (und somit auch R also die Differenzen β, γ der Kopplungskonstanten) zu variieren. Wird δ konstant gelassen, so tritt keine Berry-Phase auf — zumindest nicht im Rahmen der hier durchgeführten Störungsrechnung.

5.2 Schrieffer-Wolff-Transformation

Statt Störungstheorie anzuwenden, führen wir nun eine Schrieffer-Wolff-Transformation von H durch. D.h. wir suchen nach einer unitären Transformation U , welche H in Blockform überführt. Als Ansatz wählen wir $U = \exp(S)$ für eine noch zu bestimmende antihermitesche Matrix S , dann fordern wir, dass $H' = \exp(S)H\exp(-S)$ Blockform hat. Ferner gehen wir davon aus, δ im Vergleich zu den anderen Parametern (insbesondere α) klein ist.

Im Gegensatz zum letzten Abschnitt wählen wir nun jedoch eine andere Zerlegung, nämlich

$$H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\alpha - \delta & 0 & 0 \\ 0 & \alpha + \gamma - 3\delta & -\beta \\ 0 & -\beta & \alpha - \gamma + \delta \end{pmatrix} + \delta \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & 0 \end{pmatrix} =: H_0 + V, \quad (5.14)$$

wobei H_0 bereits die Blockgestalt hat, die wir uns von H' wünschen. Mit einem Korollar zur Baker-Campbell-Hausdorff-Formel hat H' die Form

$$H' = H + [S, H] + \frac{1}{2} [S, [S, H]] + \mathcal{O}(S^3). \quad (5.15)$$

Unter Verwendung der oben gewählten Zerlegung folgt

$$H' = H_0 + V + [S, H_0] + [S, V] + \frac{1}{2} [S, [S, H_0]] + \frac{1}{2} [S, [S, V]] + \mathcal{O}(S^3). \quad (5.16)$$

Wir versuchen nun S so zu wählen, dass $V + [S, H_0] = 0$. Dann ist $S \in \mathcal{O}(\delta)$. Entwicklung der obigen Reihe bis $\mathcal{O}(\delta^2)$ ergibt dann

$$H' = H_0 + \frac{1}{2} [S, V] + \mathcal{O}(\delta^3). \quad (5.17)$$

Mit einem allgemeinen Ansatz für S und nach dem Lösen eines linearen Gleichungssystems stellt sich heraus, dass etwa folgende Matrix ein geeignetes S darstellt:

$$S = \frac{2\sqrt{2}\delta}{(2\delta^2 - \gamma)^2 - 4\alpha^2 + \beta^2} \begin{pmatrix} 0 & -\beta & -2\alpha - \gamma + 2\delta \\ \beta & 0 & 0 \\ 2\alpha + \gamma - 2\delta & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.18)$$

Hiermit ergibt sich dann

$$H' = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\alpha - \delta + 8\delta^2\tilde{\varepsilon}(2\alpha + \gamma - 2\delta) & 0 & 0 \\ 0 & \alpha + \gamma - 3\delta & -\beta(1 + 4\delta^2\tilde{\varepsilon}) \\ 0 & -\beta(1 + 4\delta^2\tilde{\varepsilon}) & \alpha - \gamma + \delta - 8\delta^2\tilde{\varepsilon}(2\alpha + \gamma - 2\delta) \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\delta^3), \quad (5.19)$$

wobei

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{1}{(2\delta - \gamma)^2 - 4\alpha^2 + \beta^2}. \quad (5.20)$$

Taylor-Entwicklung von H' liefert, dass $\tilde{\varepsilon}$ auch durch

$$\varepsilon = \frac{1}{-4\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2} \quad (5.21)$$

ersetzt werden kann (denn die Differenz der beiden Ausdrücke liegt in $\mathcal{O}(\delta^3)$).

Die Matrix H' hat nun die gewünschte Blockgestalt, d.h. wir können wieder den invarianten Unterraum betrachten, der vom zweiten und dritten Basisvektor

aufgespannt wird. Insbesondere enthält die Matrix $\exp(-S) = \mathbb{1} - S + \mathcal{O}(\delta^2)$ die Darstellung dieser Basisvektoren in der $\{|e\rangle, |0\rangle, |1\rangle\}$ -Basis.

Wir finden

$$\begin{aligned} |0'\rangle &= \frac{2\sqrt{2}\beta\delta}{-4\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2} |e\rangle + |0\rangle \\ |1'\rangle &= \frac{2\sqrt{2}(2\alpha + \gamma)\delta}{-\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2} |e\rangle + |1\rangle. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Hierbei wird nur bis zur ersten Ordnung in δ expandiert, da die Hinzunahme einer weiteren Ordnung das verwendete Computeralgebrasystem bereits überlastet.

Damit zwischen diesen beiden Zuständen eine Berry-Phase zustandekommt, müssen die Eigenwerte entartet sein. Da dies der Nullstellenmenge eines homogenen Polynoms sechsten Grades entspricht, bedienen wir uns stattdessen eines Ergebnisses des letzten Abschnitts und „raten“, dass die beiden Eigenwerte entartet (oder zumindest nahe beieinander) sind, wenn $\beta^2 + \gamma^2 = 2\delta\gamma$. Tatsächlich ist das die Bedingung, die sich ergibt, wenn die Eigenwerte bis zur ersten Ordnung in δ bestimmt werden.

Dass die beiden Eigenwerte entartet sind, bewirkt nun, dass die untere rechte Blockmatrix von H' die Form $\varepsilon\mathbb{1}$ hat (für ein $\varepsilon \in \mathbb{R}$), d.h. $|0'\rangle, |1'\rangle$ sind beides Eigenvektoren zu ε und bilden insbesondere eine Basis des Eigenraums zu ε .

Wir können nun dieselben Schritte wie in den letzten Abschnitten mit den (parameterabhängigen) Basisvektoren $|0'\rangle, |1'\rangle$ durchführen. Wieder gehen wir dazu auf die Parametrisierung

$$(\beta, \gamma) = R(\sin(\theta), \cos(\theta)) \quad (5.23)$$

über (und dementsprechend auf $R = 2\delta\cos(\theta)$). Es interessieren uns hierbei wieder nur die antihermiteschen Anteile der Komponenten R_{ij} der Krümmungsform.

Es stellt sich heraus, dass

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(R_{\alpha\delta} - R_{\alpha\delta}^*) &\in \mathcal{O}(\delta^3) \\ \frac{1}{2}(R_{\alpha\theta} - R_{\alpha\theta}^*) &\in \mathcal{O}(\delta^3) \\ \frac{1}{2}(R_{\delta\theta} - R_{\delta\theta}^*) &\in \mathcal{O}(\delta^3). \end{aligned} \quad (5.24)$$

d.h. mit einer Schrieffer-Wolf-Transformation ist es nicht möglich, für dieses System die Existenz einer Berry-Phase (von niedrigerer Ordnung in δ als drei) nachzuweisen, die über den Phasenfaktor von -1 aus Abschnitt 3 (bzw. in Analogie dazu) bei Umrunden der Singularität bei $R = 0$ hinausgeht.

Der Unterschied zum letzten Abschnitt ist vermutlich darauf zurückzuführen, dass ein anderer Anteil des Hamiltonoperators als Störung betrachtet wurde, und dass es sich bei der Schrieffer-Wolf-Transformation im Prinzip um Störungstheorie zweiter Ordnung handelt.

6 Fazit und Ausblick

6.1 Fazit

In dieser Arbeit wird das Phänomen der Berry-Phase als Krümmungsphänomen eines Vektorbündel-Zusammenhangs für endlichdimensionale Parametermannigfaltigkeiten und endlichdimensionale Zustandsräume in der korrekten differenzialgeometrischen Sprache beschrieben. Dabei werden sehr allgemeine Ausdrücke für die Berry-Phase und den parallelen Transport des Berry-Zusammenhangs hergeleitet und bewiesen. Ferner wird in einigen Sonderfällen festgehalten, unter welchen Bedingungen die Berry-Phase nur von der Homotopieklasse des betrachteten Weges abhängt.

Diese mathematischen Überlegungen kommen anschließend zum Einsatz, wenn verschiedene quantenmechanische Systeme auf die Existenz von Berry-Phasen untersucht werden. Bei diesen Systemen handelt es sich um exchange-only Qubits, deren Hamiltonoperator um weitere Terme erweitert wurde. Es stellt sich nämlich heraus, dass allein mit Austausch-Wechselwirkung nur eine topologische (d.h. Homotopieklassen-abhängige) Berry-Phase realisierbar ist. Kommt jedoch ein homogenes Magnetfeld mit variabler Richtung hinzu, so ist es möglich, beliebige Phasengatter mit Berry-Phasen zu realisieren. Gemischte Ergebnisse wurden jedoch bei einem inhomogenen Magnetfeld in fixer Richtung erzielt, denn hier liefern Störungstheorie und Schrieffer-Wolff-Transformation unterschiedliche Ergebnisse.

6.2 Methoden und Limitationen

Ein Hauptteil der Arbeit beim Schreiben dieser Arbeit bestand in der Durchführung teilweise sehr langer Rechnungen. Die Rechnungen Abschnitte 3 und 4 wurden von Hand durchgeführt, jedoch computergestützt noch einmal verifiziert.

Für Abschnitt 5 wurde eine Hybridlösung verwendet: die Störungstheorie bzw. Schrieffer-Wolff-Transformation wurden von Hand durchgeführt; die Berechnung von Zusammenhangsformen und Krümmungsformen anschließend computergestützt.

Für das computergestützte Rechnen wurde das Mathematik-Software-System SageMath [Sag19] verwendet.

Obschon alle hier betrachteten Operatoren auf endlichdimensionalen Hilberträumen operieren, also insbesondere kompakt, folglich diagonalisierbar, sind, war oft schon das Finden der Eigenwerte eine erhebliche Schwierigkeit: häufig existierte kein geschlossener Ausdruck oder nur ein sehr komplizierter. So wurde bereits das Diagonalisieren zu einer sehr langen symbolischen Rechnung, ganz zu schweigen von der Berechnung von Zusammenhangs- und Krümmungsform, die die zur Verfügung stehenden Computerressourcen schlicht überforderte. Aus diesem Grund mussten viele Systeme wieder verworfen werden, insbesondere Mehr-Qubit-Systeme, auf die im nächsten Abschnitt noch einmal eingegangen wird.

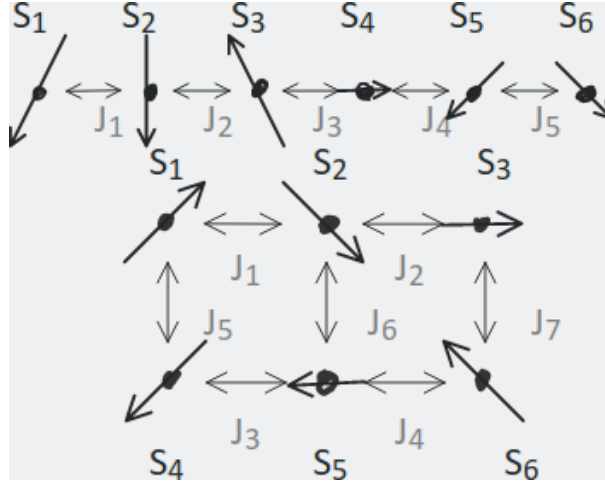


Abbildung 4: Lineares (oben) und Blocklayout (unten) eines 2-Qubit-exchange-only-Systems

Das Problem der zu komplizierten Eigenwerte konnte in Abschnitt 5 dadurch etwas umgangen werden, dass störungstheoretisch gerechnet wurde. Jedoch ist unklar, ob eine Näherung hier überhaupt gerechtfertigt ist, da jede tatsächliche Abweichung der Eigenwerte theoretisch zu einer unkontrollierbaren dynamischen Phase führt.

6.3 Ausblick

6.3.1 Mehr-Qubit-Gatter

In Abschnitt 4 wird gezeigt, dass beliebige Phasengatter als Berry-Phase bei einem exchange-only Qubit in einem homogenen rotierbaren Magnetfeld realisiert werden können. Von dort aus kann man weiter forschen und fragen, welche Zwei-Qubit-Quantengatter in einem System mit zwei exchange-only Qubits als Berry-Phase auftreten können. In diese Richtung wurden auch für diese Arbeit schon einige Untersuchungen angestellt, die jedoch meist daran scheiterten, dass das Problem zu hochdimensional ist (bei zwei exchange-only Qubits hat der Hilbertraum 64 Dimensionen), oder dass sich die Anfangszustände für keine Kombination der Parameterwerte im selben Eigenraum befinden.

Insbesondere wurden hierbei verschiedene Kombinationen aus homogenen und inhomogenen Magnetfeldern und verschiedenen Layouts (siehe Abbildung 4) ausprobiert, sowie 2-Qubit-Systeme, deren Qubits nur aus zwei Spins bestehen. Hierbei wurde auch eine 4-Spin-Kopplung der Form $(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)(\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4)$ hinzugenommen.

Ein vielversprechender Fall, der bei diesen Untersuchungen auftauchte, ist

$$H = - \sum_{i=1}^5 J_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}, \quad (6.1)$$

also eine lineare Anordnung zweier exchange-only Qubits, die in der Mitte über Austauschwechselwirkung gekoppelt sind und sich in einem homogenen externen Magnetfeld variabler Richtung befinden.

Dieser Hamiltonoperator kommutiert mit Gesamtspin-Betrag S^2 , jedoch nicht mit der Spin-Projektion S_z , sodass man sich bei der Betrachtung auf den Raum

$$\text{Eig}(S^2, \hbar^2 0(0+1)) \oplus \text{Eig}(S^2, \hbar^2 1(1+1)) \quad (6.2)$$

beschränken kann. Dieser ist jedoch immernoch 14-dimensional, sodass eine Rechnung auch schwierig ist. Dort befindet sich aber tatsächlich unter bestimmten Bedingungen eine Produktbasis von exchange-only Qubit-Zuständen im selben Eigenraum. Es war jedoch nicht möglich, eine algebraische Bedingung an die Parameter zu finden, die eine gleich bleibende Vielfachheit des Eigenwerts sicherstellt. Mit anderen Worten, es konnte keine algebraische Bedingung für die Parameterrmannigfaltigkeit gefunden werden.

6.3.2 Machbarere Realisierung von 1-Qubit-Gattern

Weitere Untersuchungen, die im Zuge dieser Arbeit durchgeführt wurden, hatten zum Ziel, eine Methode zu finden, Phasengatter zu realisieren (wie in Abschnitt 4), ohne dabei ein Magnetfeld zu verwenden (bzw. nur ein konstantes Magnetfeld). Die Motivation hierzu ist, dass die physikalische Realisierung dieses Phänomens in Halbleitern immer noch die Änderung einer makroskopischen Größe erfordert, nämlich der Richtung des Magnetfelds, und nicht allein durch das Anlegen verschiedener Spannungen bewirkt werden kann. Dies hat erhebliche Geschwindigkeitseinbußen zur Folge.

Zu diesem Zweck wurde ein 3-Spin-System in verschiedenen inhomogenen Magnetfeldern mit isotroper oder anisotroper Kopplung betrachtet. Hierbei sind jedoch auch meist die charakteristischen Polynome derart hochgradig, bzw. die Eigenwerte derart kompliziert (auch zu viele Variablen), dass eine exakte Betrachtung nicht mehr gut machbar ist.

Die Rechnung aus Abschnitt 5, die ebenfalls in diese Kategorie fällt, wurde daher näherungsweise durchgeführt.

6.3.3 Andere Ansätze

Eine in dieser Arbeit stets verwendete Voraussetzung ist, dass der Hamiltonoperator auf dem Vektorbündel die Form $\varepsilon \mathbb{1}$ hat, also dass die Faser über jedem Punkt im Parameterraum im selben Eigenraum des Hamiltonoperators liegt. Grund hierfür ist, dass nur so das Auftreten (potenziell unkontrollierbarer) dynamischer Phasen verhindert werden kann. Wenn es nun ein Verfahren gäbe,

physikalisch diese dynamischen Phasen zu kontrollieren, so wäre eine allgemeinere Betrachtung möglich.

Ein weiterer Ansatz, der verfolgenswert ist, ist, „rückwärts zu arbeiten“, d.h. mit einem Vektorbündel-Zusammenhang anzufangen, mit dessen Krümmung Quantengatter realisierbar sind, und dann daraus einen Hamiltonoperator zu konstruieren, der diesen Zusammenhang als Berry-Zusammenhang hat, und anschließend zu versuchen, diesen Hamiltonoperator durch Operatoren mit physikalischer Bedeutung auszudrücken.

Ob dies zielführend ist, ist allerdings unklar.

Anhang

A Grundbegriffe der Differenzialgeometrie

A.0.1 Definition: Sei (M, τ) ein topologischer Raum.

1. Das Tupel (U, ϕ) heißt *Karte*, falls $U \subseteq M$ offen ist und es einen Banachraum F gibt mit $\phi : U \rightarrow F$, sodass ϕ ein Homöomorphismus zwischen U und $\phi(U)$ ist.
2. Zwei Karten $(U, \phi), (U', \phi')$ heißen *C^∞ -kompatibel*, falls $\phi' \circ \phi^{-1}|_{\phi(U \cap U')} : \phi(U \cap U') \rightarrow \phi'(U \cap U')$ als Abbildung zwischen (Teilmengen von) zwei Banachräumen glatt ist.
3. Eine Menge \mathcal{A} von C^∞ -kompatiblen Karten heißt *C^∞ -Atlas*, falls die Definitionsmengen der Karten eine Überdeckung von M sind.
4. Ist \mathcal{A} ein C^∞ -Atlas über M , so heißt das Tupel (M, \mathcal{A}) *glatte Mannigfaltigkeit*.

A.0.2 Definition: Eine Abbildung $f : M \rightarrow N$ zwischen zwei glatten Mannigfaltigkeiten $(M, \mathcal{A}), (N, \mathcal{B})$ heißt *glatt*, falls für jede Karte $(U, \phi) \in \mathcal{A}$ und jede Karte $(V, \psi) \in \mathcal{B}$ die Abbildung $\psi \circ f \circ \phi^{-1}$ als Abbildung zwischen (offenen Teilmengen von) Banachräumen glatt ist.

Die Menge aller glatten Abbildungen $M \rightarrow N$ wird mit $C^\infty(M, N)$ bezeichnet. Ist $N = \mathbb{R}$ mit dem trivialen Atlas $\{(\mathbb{R}, \text{id}_{\mathbb{R}})\}$ ausgestattet, so schreibt man stattdessen $C^\infty(M)$. Eine Funktion $f \in C^\infty(M)$ wird auch als *Skalarfeld* bezeichnet.

Mit punktweiser Multiplikation und Addition wird $C^\infty(M)$ zu einem Ring und mit punktweiser Skalierung und Addition zu einem Vektorraum.

A.0.3 Bemerkung: Eine Mannigfaltigkeit ist eine Menge abstrakter Punkte. Der Zugang zur Differenzierbarkeit und anderen Konzepten wird mittels der Karten, die als lokale Koordinatensysteme oder Parametrisierungen fungieren, auf Banachräume zurückgezogen. Die Kompatibilität der Karten innerhalb eines Atlas stellt hierbei sicher, dass diese Begriffe nicht von der verwendeten Karte abhängen.

Durch die Forderung, dass das Bild einer Karte eine offene Teilmenge eines Banachraums ist, ist gleichzeitig schon gefordert, dass alle Banachräume, zu denen Karten um einen Punkt x existieren, dieselbe Dimension haben. Diese Dimension heißt Dimension der Mannigfaltigkeit im Punkt x . Aus der Definition folgt, dass die Dimension eine lokal konstante Größe ist. Eine Mannigfaltigkeit lässt sich also in Zusammenhangskomponenten konstanter Dimension zerlegen. Im Folgenden wird immer angenommen, die betrachteten Mannigfaltigkeiten haben konstante Dimension.

A.0.4 Beispiel: Dass der Differenzierbarkeitsbegriff entscheidend vom verwendeten Atlas abhängt, sieht man, wenn man die Mannigfaltigkeiten $M, N = \mathbb{R}$ betrachtet, wobei M mit dem Atlas $\{(M, f)\}$ ausgestattet ist ($f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, x \mapsto x^3$) und N mit dem trivialen Atlas.

Da f bijektiv und stetig ist und eine stetige Umkehrabbildung hat, ist (\mathbb{R}, f) eine Karte von M . Da f als Definitionsbereich ganz \mathbb{R} hat, ist diese Karte bereits ausreichend, um einen Atlas zu definieren. Fasst man nun f^{-1} ($f^{-1}(x) = \sqrt[3]{x}$) als Abbildung von $N \rightarrow N$ auf, so ist f^{-1} nicht glatt, denn mit der Karte (N, id_N) müsste hierfür die Abbildung

$$\text{id}_N \circ f^{-1} \circ \text{id}_N^{-1} = f^{-1} \quad (\text{A.1})$$

überall differenzierbar sein, was sie in der 0 nicht ist. Fasst man jedoch f^{-1} als Abbildung $N \rightarrow M$ auf, so ist bei Benutzung der Karten (N, id_N) , (M, f) die Abbildung

$$f \circ f^{-1} \circ \text{id}_N^{-1} = \text{id}_\mathbb{R} \quad (\text{A.2})$$

glatt. Das heißt $f \in C^\infty(N, M)$, aber $f \notin C^\infty(N, N)$.

A.0.5 Definition: Sei M eine glatte Mannigfaltigkeit.

1. Eine \mathbb{R} -lineare Abbildung $\xi : C^\infty(M) \rightarrow \mathbb{R}$ heißt *Tangentialvektor* an $x \in M$, falls

$$\forall f, g \in C^\infty(M) : \xi(fg) = \xi(f)g(x) + f(x)\xi(g), \quad (\text{A.3})$$

also falls ξ die Leibniz-Regel erfüllt. Man kann zeigen, dass dies äquivalent ist dazu, dass es eine zum Atlas auf M kompatible Karte (U, ϕ) mit $x \in U$ gibt, sodass

$$\forall f \in C^\infty(M) : \xi(f) = \partial_1(f \circ \phi^{-1})(\phi(x)), \quad (\text{A.4})$$

also dass ξ einem Richtungsableitungs-Operator im Punkt x entspricht.

2. Die Menge aller Tangentialvektoren an $x \in M$ wird mit $T_x M$ bezeichnet und heißt *Tangentialraum* an M . $T_x M$ verfügt über die Struktur eines \mathbb{R} -Vektorraums. Hat M die Dimension d , so ist $T_x M$ auch d -dimensional.
3. Die Vereinigung $TM = \bigcup_{x \in M} T_x M$ ist das *Tangentialbündel* von M und ist ebenfalls eine glatte Mannigfaltigkeit.
4. Eine Abbildung $X \in C^\infty(M, TM)$ heißt *(Tangential-)Vektorfeld*, falls

$$\forall x \in M : X_x \in T_x M, \quad (\text{A.5})$$

also falls jedem Punkt ein Tangentialvektor an diesem Punkt zugeordnet wird. Die Menge aller Vektorfelder wird mit $\Gamma(TM)$ bezeichnet. Durch punktweise Addition und Skalierung wird $\Gamma(TM)$ zu einem \mathbb{R} -Vektorraum. Mit punktweiser Multiplikation hat $\Gamma(TM)$ auch die Struktur eines $C^\infty(M)$ -Moduls.

Ein Vektorfeld kann via $X(f)(x) = X_x f$ auch als \mathbb{R} -lineare Funktion $X : C^\infty(M) \rightarrow C^\infty(M)$ aufgefasst werden, die die Leibniz-Regel

$$\forall f, g \in C^\infty(M) : X(fg) = fX(g) + X(f)g \quad (\text{A.6})$$

erfüllt.

A.0.6 Beispiel: Sei (U, ϕ) eine Karte, die U auf den Banachraum F abbildet. Dann lässt sich damit das Konzept eines Tangentialvektors an $x \in U$ konkretisieren, denn mit ϕ können alle Richtungsableitungen auf F auf die Mannigfaltigkeit übertragen werden. Sei dazu $(e_i)_{i \in I}$ eine \mathbb{R} -Basis von F . Definiere dann

$$\xi_i(f) := \partial_i(f \circ \phi^{-1})(\phi(x)) = \left. \frac{d}{dt} f(\phi^{-1}(\phi(x) + te_i)) \right|_{t=0} \quad (\text{A.7})$$

(hierbei ist $f'(x)(h)$ die Fréchet-Ableitung von f in x in Richtung h). Die $(\xi_i)_{i \in I}$ sind dann eine \mathbb{R} -Basis von $T_x M$. Ferner kann man auch die Tangentialvektorfelder $X_i \in \Gamma(TM, U)$ mit

$$X_{i,x}(f) := (f \circ \phi^{-1})'(\phi(x))(e_i) \quad (\text{A.8})$$

definieren, die jedem Punkt den entsprechenden Basisvektor ξ_i in diesem Punkt zuordnen. Diese sind dann eine $C^\infty(U)$ -Basis des (dadurch freien) $C^\infty(M)$ -Moduls $\Gamma(TU)$.

Ist die Karte aus dem Kontext klar, so bezeichnet man die Vektorfelder dieser Basis auch als $\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\right)$.

A.0.7 Bemerkung: Passend zur Definition der Mannigfaltigkeit als abstrakte Menge von Punkten, die lokal durch ein Koordinatensystem quantifiziert werden, ist auch der Tangentialraum („Raum der Richtungen“) definiert als Menge abstrakter Größen, die lokal durch ein Koordinatensystem quantifiziert werden können.

Dass der Name Tangentialvektor angemessen ist, sehen wir, wenn wir einen Koordinatensystemwechsel betrachten. Seien zwei Karten $(U, \phi), (\tilde{U}, \tilde{\phi})$ mit $x \in U \cap \tilde{U}$ gegeben. Diese Karten erzeugen Basen $(\xi_i)_{i \in I}$ und $(\tilde{\xi}_i)_{i \in I}$ des Tangentialraums $T_x M$. Die Vektoren der Basis $(\tilde{\xi}_i)_{i \in I}$ können nun durch die Vektoren der Basis $(\xi_i)_{i \in I}$ ausgedrückt werden. Mit etwas Rechenarbeit folgt

$$\tilde{\xi}_i = \sum_{j \in I} \partial_i(\phi \circ \tilde{\phi}^{-1})(\tilde{\phi}(x))_j \xi_j, \quad (\text{A.9})$$

sodass bei Koordinatentransformation von ϕ nach $\tilde{\phi}$ die Punkte mit $\tilde{\phi} \circ \phi^{-1}$ transformiert werden, jedoch die Tangentialvektoren mit der Jacobi-Matrix der Umkehrabbildung $\phi \circ \tilde{\phi}^{-1}$. Tangentialvektoren transformieren sich demnach *kontravariant*.

Damit (und mit Abschnitt 1.2) haben wir das Thema der Differenziation auf Mannigfaltigkeiten ergründet. Nun wenden wir uns noch der Integration auf Mannigfaltigkeiten zu.

A.0.8 Definition: Sei M eine glatte Mannigfaltigkeit und sei F ein Vektorraum

1. Eine multilineare Abbildung $F^n \rightarrow \mathbb{R}$ heißt n -Form, falls sie total antisymmetrisch ist, also bei Vertauschung zweier beliebiger Argumente das Vorzeichen wechselt. Die Menge der n -Formen heißt $\Lambda^n(F)$ und bildet ebenfalls einen Vektorraum.
2. Eine glatte Abbildung $\omega : M \rightarrow \bigcup_{x \in M} \Lambda^n(T_x M)$ heißt ebenfalls n -Form oder *Differenzialform*, falls

$$\forall x \in M : \omega_x \in \Lambda^n(T_x M). \quad (\text{A.10})$$

Bezeichne die Menge der n -Formen als $\Lambda^n(M)$. Wie $\Gamma(TM)$ ist auch $\Lambda^n(M)$ ein \mathbb{R} -Vektorraum und ein $C^\infty(M)$ -Modul.

Analog zu Definition A.0.5 kann man eine Differenzialform ω kanonisch mit der multilinearen Abbildung

$$\Gamma(TM)^n \rightarrow C^\infty(M), (X_1, \dots, X_n) \mapsto (x \mapsto \omega_x(X_{1,x}, \dots, X_{n,x})) \quad (\text{A.11})$$

identifizieren, was wir im Folgenden tun werden.

3. Zu einer n -Form ω können wir die $n+1$ -Form $d\omega$ wie folgt assoziieren:

$$\begin{aligned} d\omega(X_1, \dots, X_{n+1}) &:= \sum_{i=1}^{n+1} (-1)^{i+1} X_i(\omega(X_1, \dots, \widehat{X_i}, \dots, X_{n+1})) \\ &\quad + \sum_{i < j} (-1)^{i+j} \omega(X_i \circ X_j - X_j \circ X_i, X_1, \dots, \widehat{X_i}, \dots, \widehat{X_j}, \dots, X_{n+1}). \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

(der Hut bedeutet, dass das Element weggelassen wird). Diese $n+1$ -Form heißt *äußere Ableitung* von ω .

4. Zu einer p -Form f und einer q -Form g assoziiere die $p+q$ -Form

$$(f \wedge g)(X_1, \dots, X_{p+q}) := \frac{1}{p!q!} \sum_{\sigma \in S_{p+q}} (-1)^\sigma f(X_{\sigma(1)}, \dots, X_{\sigma(p)}) g(X_{\sigma(p+1)}, \dots, X_{\sigma(p+q)}), \quad (\text{A.13})$$

das *äußere Produkt* von f, g .

Es gilt $g \wedge f = (-1)^{pq} f \wedge g$. Diese Definition ist sowohl für Formen auf Banachräumen als auch für Differenzialformen gültig.

A.0.9 Beispiel: Sei M eine glatte Mannigfaltigkeit.

1. Mit der Definition von n -Formen ist es konsistent, wenn man reelle Zahlen bzw. Skalarfelder als 0-Formen bezeichnet. Demnach ist für $f \in C^\infty(M)$ die Abbildung df eine 1-Form. Diese ist eine Verallgemeinerung des Gradienten auf Mannigfaltigkeiten.

2. Sei (U, ϕ) eine Karte. Dann sind die Abbildungen ϕ_i , die jedem Punkt in U die i -te Koordinate der Karte ϕ zuordnen, glatte Funktionen. Sei $x \in U$ und sei $(X_i)_{i \in I}$ die von der Karte ϕ erzeugte Basis von $\Gamma(TU)$, dann ist

$$d\phi_j(X_i)(x) = X_i(\phi_j)(x) = \left. \frac{d}{dt} \phi_j(\phi^{-1}(\phi(x) + te_i)) \right|_{t=0} = \left. \frac{d}{dt} \pi_j(x + te_i) \right|_{t=0} = \delta_{ij}, \quad (\text{A.14})$$

wobei π_j die die Projektion auf die j -te Komponente ist.

Das heißt, die $(d\phi_i)_{i \in I}$ sind die duale Basis zu den $(X_i)_{i \in I}$. Insbesondere ist somit $\dim_{C^\infty(U)}(\Lambda^1(U)) = \dim_{C^\infty(U)}(\Gamma(TU)) = \dim(M)$.

Ist die Karte ϕ aus dem Kontext klar, so bezeichnet man die Linearformen dieser Basis auch kurz als $(dx^i)_{i \in I}$.

3. Bezüglich der Basis von $\Lambda^1(U)$, die von einer Karte (U, ϕ) erzeugt wird, kann man den Gradienten df einer Funktion $f \in C^\infty(M)$ auf U so darstellen:

$$df = \sum_{i \in I} X_i(f) d\phi_i = \sum_{i \in I} \frac{\partial f}{\partial x_i} dx^i. \quad (\text{A.15})$$

4. Aus einer Basis von $\Lambda^1(F)$ eines Banachraums F lassen sich auch Basen von $\Lambda^k(F)$ erzeugen. Sei dazu $(e_i)_{i \in I}$ eine Basis von $\Lambda^1(F)$, dann ist

$$(e_{i_1} \wedge \cdots \wedge e_{i_k})_{i_1 < \cdots < i_k \in I} \quad (\text{A.16})$$

eine Basis von $\Lambda^k(F)$. Insbesondere sieht man daraus, dass

$$\dim(\Lambda^n(F)) = \binom{\dim(F)}{n}, \quad (\text{A.17})$$

also $\Lambda^n = \{0\}$ für $n > \dim(F)$.

Wir sehen daraus auch, dass $\Lambda^{\dim(F)}(F)$ ein eindimensionaler Vektorraum ist, der etwa von

$$e_1 \wedge \cdots \wedge e_{\dim(F)} \quad (\text{A.18})$$

über \mathbb{R} aufgespannt wird.

A.0.10 Bemerkung: 1. Ist M n -dimensional, so ist nach dem letzten Beispiel in jedem Punkt x der Raum $\Lambda^n(T_x M)$ 1-dimensional. Für zwei Karten $(U, \phi), (U, \tilde{\phi})$ (mit $x \in U$) auf Banachräume mit bekannter Basis können kanonisch Elemente von $\Lambda^n(T_x M)$ definiert werden:

$$\omega := d\phi_1 \wedge \cdots \wedge d\phi_n(x), \quad \tilde{\omega} := d\tilde{\phi}_1 \wedge \cdots \wedge d\tilde{\phi}_n(x). \quad (\text{A.19})$$

ω und $\tilde{\omega}$ hängen dann über einen skalaren Faktor zusammen:

$$\tilde{\omega} = \det((\tilde{\phi} \circ \phi^{-1})'(\phi(x))) \omega, \quad (\text{A.20})$$

d.h. beim Übergang von der Karte ϕ zur Karte $\tilde{\phi}$ wird ω mit der Determinante der Jacobi-Matrix der Kartenwechsel-Abbildung multipliziert.

2. Im uns bekannten Kontext der klassischen Physik (3-dimensionale Mannigfaltigkeit) gibt es vier Arten von Differenzialformen, mit denen gearbeitet wird:

$$\begin{aligned}
\omega_0 &= \phi \\
\omega_1 &= \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = \sum_{i=1}^3 F_i dx^i \\
\omega_2 &= \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{ijk} B^i dx^j \wedge dx^k \\
\omega_3 &= \rho dV = \rho dx^1 \wedge dx^2 \wedge dx^3,
\end{aligned} \tag{A.21}$$

wobei \mathbf{F}, \mathbf{B} „Vektorfelder“ und ϕ, ρ Skalarfelder sind. $d\mathbf{r}, d\mathbf{S}, dV$ sind hierbei ein Verschiebungsdifferenzial, ein Oberflächendifferenzial und ein Volumendifferenzial.

Die äußeren Ableitungen dieser Differenzialformen sehen folgendermaßen aus:

$$d\omega_0 = \nabla \phi \cdot d\mathbf{r}, \quad d\omega_1 = \nabla \times \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S}, \quad d\omega_2 = \nabla \cdot \mathbf{B} dV, \quad d\omega_3 = 0. \tag{A.22}$$

A.0.11 Definition: Sei M eine glatte Mannigfaltigkeit der Dimension n , $\omega \in \Lambda^n(M)$ und (U, ϕ) eine Karte mit $\phi(U) \subseteq \mathbb{R}^n$. Definiere das Integral von ω über U durch

$$\int_U \omega := \int_{\phi(U)} \omega(X_1, \dots, X_n) \circ \phi^{-1} d\mu, \tag{A.23}$$

wobei $(X_i)_i$ die durch die Karte ϕ erzeugten Vektorfelder sind und μ das n -dimensionale Lebesgue-Maß ist.

A.0.12 Bemerkung: Dass die obige Definition von der Karte unabhängig ist, hängt damit zusammen, dass nach Kartenwechsel die Vorfaktoren, die durch die Transformation aller $(X_i)_i$ entstehen, genau die Integrationsdeterminante ergeben, die für die Substitution im Integral benötigt wird. Für die gesamte Definition ist aber wichtig, dass ω eine Differenzialform *maximaler* Stufe ist.

Soll statt dem Definitionsgebiet einer Karte über ein größeres Gebiet, potenziell die gesamte Mannigfaltigkeit, integriert werden, so kann mittels einer Zerlegung der Eins [KN63, Anhang III] die Differenzialform ω als Summe von Differenzialformen geschrieben werden, die alle nur innerhalb der Definitionsmenge einer Karte von Null verschieden sind, also alle getrennt voneinander integrierbar sind. Diese Integrale werden dann zum Gesamtergebnis aufsummiert.

A.0.13 Satz (Stokes): Sei M eine Mannigfaltigkeit und sei $N \subseteq M$ eine Untermannigfaltigkeit, so dass der Rand ∂N ebenfalls eine Mannigfaltigkeit ist. Sei ω eine $\dim(N) - 1$ -Form, die auf N und auf ∂N definiert ist. Dann gilt

$$\int_N d\omega = \int_{\partial N} \omega. \tag{A.24}$$

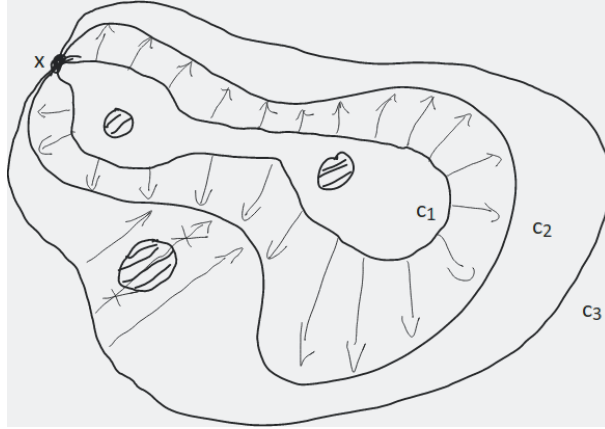


Abbildung 5: Beispiel homotoper und nicht-homotoper Kurven

A.0.14 Bemerkung: Der letzte Satz ist der verallgemeinerte Satz von Stokes. Mit den Ausdrücken aus Bemerkung A.0.10 ergeben sich hieraus respektive der Hauptsatz der Integral- und Differenzialrechnung, der Satz von Stokes, der Satz von Gauß, sowie (in zwei Dimensionen) der Satz von Green.

B Etwas Differenzialtopologie

Sei hier X stets eine glatte Mannigfaltigkeit, sei $x \in X$ und $k \in \mathbb{N}_0 \cup \{\infty\}$.

- B.0.1 Definition:**
1. Es bezeichne $\Pi^k(X, x)$ die Menge aller stückweise k -mal stetig differenzierbaren (und stetigen) Kurven $\gamma : [0, 1] \rightarrow X$ mit $\gamma(0) = \gamma(1) = x$.
 2. Eine Abbildung $\phi : [0, 1]^2 \rightarrow M$ heißt (k) -Homotopie auf $\Pi^k(X, x)$, falls ϕ stetig ist, falls es offene Intervalle I_1, \dots, I_m und J_1, \dots, J_n gibt mit $[0, 1] = \bigcup_{i=1}^m \overline{I_i} = \bigcup_{j=1}^n \overline{J_j}$, sodass ϕ auf jedem $I_i \times J_j$ k -mal stetig differenzierbar ist, und falls $\phi(\cdot, 0) = \phi(\cdot, 1) = x$.
 3. Zwei Kurven $\gamma_1, \gamma_2 \in \Pi^k(X, x)$ heißen zueinander k -homotop, i.Z. $\gamma_1 \simeq_k \gamma_2$, falls es eine k -Homotopie ϕ gibt, sodass gilt

$$\forall t \in [0, 1] : \phi(0, t) = \gamma_1(t) \quad \text{und} \quad \phi(1, t) = \gamma_2(t), \quad (\text{B.1})$$

also falls man (stückweise) k -mal stetig differenzierbar zwischen ihnen interpolieren kann.

B.0.2 Bemerkung: Der Begriff der Homotopie (der sich auch noch weitaus stärker verallgemeinern lässt) erlaubt uns, von Kurven zu reden, die man glatt ineinander umformen kann, ohne dabei den designierten Bildbereich zu verlassen.

In Abbildung 5 sind drei Kurven $c_1, c_2, c_3 \in \Pi^0(X, x)$ abgebildet. X ist dabei die Ebene \mathbb{R}^2 , aus der die drei schraffierten Bereiche herausgenommen wurden. Die Kurven c_1, c_2 umschließen einen Bereich, der komplett in X liegt, und insbesondere deuten die Pfeile schon an, wie c_1 in c_2 deformiert werden kann. Somit sind c_1 und c_2 homotop. Dasselbe kann jedoch nicht für c_3 und c_2 gesagt werden, da c_3 bei Deformation irgendwann den schraffierten Bereich „überqueren“ muss und dann nicht mehr in X verläuft.

Der Begriff der Homotopie hat große Bedeutung in der Funktionentheorie, der Differentialtopologie sowie der homologischen Algebra und algebraischen Topologie.

B.0.3 Lemma: \simeq_k ist eine Äquivalenzrelation.

Beweis. Es sind drei Dinge zu prüfen:

Reflexivität : Sei $\gamma \in \Pi^k(X, x)$ eine Kurve. Definiere $\phi(s, t) := \gamma(t)$. Dann ist ϕ k -mal stetig differenzierbar und es gilt $\phi(0, \cdot) = \gamma = \phi(1, \cdot)$ sowie $\phi(s, 0) = \phi(s, 1) = x$, d.h. $\gamma \simeq_k \gamma$.

Symmetrie : Seien γ_1, γ_2 k -homotop und sei ϕ eine k -Homotopie, die zwischen γ_1, γ_2 interpoliert. Dann definiere $\tilde{\phi}(s, t) := \phi(1 - s, t)$. Diese Funktion ist ebenso wie ϕ (stückweise) k -mal stetig differenzierbar.

Es gilt

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}(0, \cdot) &= \phi(1, \cdot) = \gamma_2, \\ \tilde{\phi}(1, \cdot) &= \phi(0, \cdot) = \gamma_1\end{aligned}\tag{B.2}$$

sowie $\tilde{\phi}(s, 0) = \tilde{\phi}(s, 1) = x$, also ist $\gamma_2 \simeq_k \gamma_1$.

Transitivität : Gelte $\gamma_1 \simeq_k \gamma_2$ und $\gamma_2 \simeq_k \gamma_3$, seien ϕ_1, ϕ_2 jeweils k -Homotopien, die zwischen γ_1, γ_2 bzw. γ_2, γ_3 interpolieren. Definiere

$$\phi_3(s, t) := \begin{cases} \phi_1(2s, t) & s \leq \frac{1}{2} \\ \phi_2(2s - 1, t) & s > \frac{1}{2} \end{cases}.\tag{B.3}$$

Diese Abbildung ist eine k -Homotopie, die zwischen γ_1, γ_3 interpoliert.

□

Diese Äquivalenzrelation erlaubt uns nun, von $\Pi^k(X, x)$ auf $\pi_1^k(X, x) := \Pi^k(X, x) / \simeq$ überzugehen, also statt geschlossener Kurven Äquivalenzklassen zueinander homotoper Kurven zu betrachten.

B.0.4 Lemma: $\pi_1^k(X, x)$ ausgestattet mit der Konkatination hat die Struktur einer Gruppe, genannt die *erste Fundamentalgruppe* von X .

Beweis. Wir definieren auf $\Pi^k(X, x)$ die Konkatination $\gamma_1 || \gamma_2$ zweier Kurven durch

$$(\gamma_1 || \gamma_2)(t) := \begin{cases} \gamma_1(2t) & t \leq \frac{1}{2} \\ \gamma_2(2t - 1) & t > \frac{1}{2} \end{cases}.\tag{B.4}$$

Da $\gamma_1(1) = \gamma_2(0) = x$ und beide Abbildungen stetig sind, ist das Resultat wieder eine stetige Kurve. Da $\gamma_1(0) = \gamma_2(1) = x$, ist $\gamma_1 || \gamma_2 \in \Pi(X, x)$.

Für $[\gamma_1], [\gamma_2] \in \pi_1^k(X, x)$ definiere die Verknüpfung $[\gamma_1] + [\gamma_2] := [\gamma_1 || \gamma_2]$.

Wohldefiniertheit Seien hierfür $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4 \in \Pi^k(X, x)$ gegeben, wobei $\gamma_1 \simeq_k \gamma_2$ und $\gamma_3 \simeq_k \gamma_4$. Zu zeigen ist, dass auch $\gamma_1 || \gamma_3 \simeq_k \gamma_2 || \gamma_4$. Seien hierzu ϕ_1, ϕ_2 jeweils k -Homotopien, die zwischen γ_1, γ_2 und zwischen γ_3, γ_4 interpolieren. Dann definiere

$$\phi(s, t) := \begin{cases} \phi_1(s, 2t) & t \leq \frac{1}{2} \\ \phi_2(s, 2t - 1) & t > \frac{1}{2} \end{cases}. \quad (\text{B.5})$$

Es gilt nun $\phi(0, \cdot) = \gamma_1 || \gamma_3$ und $\phi(1, \cdot) = \gamma_2 || \gamma_4$, ferner ist ϕ stückweise k -mal stetig differenzierbar, da $\phi_1(s, 1) = \phi_2(s, 0) = x$ für jedes s .

Assoziativität Seien $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3 \in \Pi^k(X, x)$, dann betrachte $\eta_1 := (\gamma_1 || \gamma_2) || \gamma_3$ und $\eta_2 := \gamma_1 || (\gamma_2 || \gamma_3)$. Im Allgemeinen werden diese Kurven nicht gleich sein, jedoch zueinander k -homotop. Nach Definition nehmen sie die Werte

$$\eta_1(t) = \begin{cases} \gamma_1(4t) & t \leq \frac{1}{4} \\ \gamma_2(4t - 1) & \frac{1}{4} < t \leq \frac{1}{2} \\ \gamma_3(2t - 1) & \frac{1}{2} < t \end{cases} \quad \text{und} \quad \eta_2(t) = \begin{cases} \gamma_1(2t) & t \leq \frac{1}{2} \\ \gamma_2(4t - 2) & \frac{1}{2} < t \leq \frac{3}{4} \\ \gamma_3(4t - 3) & \frac{3}{4} < t \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

an. Definiere nun

$$\phi(s, t) := \begin{cases} \gamma_1\left(\frac{4t}{2-s}\right) & t \leq \frac{2-s}{4} \\ \gamma_2(4t + s - 2) & \frac{2-s}{4} < t \leq \frac{3-s}{4} \\ \gamma_3\left(\frac{4t + s - 3}{1+s}\right) & \frac{3-s}{4} < t \end{cases}. \quad (\text{B.7})$$

Einsetzen von $s = 0$ und $s = 1$ ergibt die Ausdrücke für η_2 und η_1 , einsetzen von $t = 0$ und $t = 1$ ergibt konstant x , d.h. ϕ ist eine k -Homotopie zwischen η_2, η_1 , folglich $\eta_1 \simeq \eta_2$.

Neutrales Element Definiere $\eta(t) := x$, dann liegt $\eta \in \Pi^k(X, x)$. Sei nun $\gamma \in \Pi^k(X, x)$, dann ist $[\gamma] + [\eta] = [\gamma]$. Definiere dazu

$$\phi(s, t) := \begin{cases} \gamma\left(\frac{2t}{1+s}\right) & t \leq \frac{1+s}{2} \\ x & \frac{1+s}{2} < t \end{cases}. \quad (\text{B.8})$$

Dann ist $\phi(0, \cdot) = \gamma || \eta$ und $\phi(1, \cdot) = \gamma$ sowie $\phi(s, 0) = \phi(s, 1) = x$, wobei ϕ stetig ist. Somit sind $\gamma || \eta$ und γ k -homotop.

Die Elemente von $[\eta]$ sind die Kurven, die sich auf einen Punkt zusammenziehen lassen. Sie werden auch als *zusammenziehbare* oder *nullhomotope* Kurven bezeichnet.

Inverse Sei $\gamma \in \Pi^k(X, x)$, dann definiere

$$\tilde{\gamma}(t) := \gamma(1 - t). \quad (\text{B.9})$$

Sei ferner

$$\phi_1(s, t) := \begin{cases} \gamma(2st) & t \leq \frac{1}{2} \\ \gamma(1 - 2st) & \frac{1}{2} < t \end{cases} \quad \text{und} \quad \phi_2(s, t) := \begin{cases} \tilde{\gamma}(2st) & t \leq \frac{1}{2} \\ \tilde{\gamma}(1 - 2st) & \frac{1}{2} < t \end{cases}. \quad (\text{B.10})$$

Dann sind die $\phi_{1/2}$ stückweise k -mal stetig differenzierbar mit $\phi_{1/2}(s, 0) = \phi_{1/2}(s, 1) = x$. Die $\phi_{1/2}$ sind also k -Homotopien. Wegen $\phi_1(0, t) = \phi_2(0, t) = x$ (für alle t), $\phi_1(1, \cdot) = \gamma||\tilde{\gamma}$ und $\phi_2(1, \cdot) = \tilde{\gamma}||\gamma$ sind es jeweils k -Homotopien zwischen der konstanten Kurve und $\gamma||\tilde{\gamma}$ bzw. $\tilde{\gamma}||\gamma$. Somit ist $\gamma||\tilde{\gamma} \simeq_k \tilde{\gamma}||\gamma \simeq_k \eta$, also besitzt $[\gamma]$ ein Inverses in $\pi_1^k(X, x)$. \square

Nun stellen wir uns die Frage, wie stark die Struktur von $\pi_1^k(X, x)$ überhaupt vom Punkt x abhängt.

B.0.5 Lemma: Seien $x, y \in X$. Wenn es einen stückweise k -mal stetig differenzierbaren Weg $\zeta : [0, 1]$ gibt, der x und y verbindet, so sind $\pi_1^k(X, x)$ und $\pi_1^k(X, y)$ isomorph.

Beweis. Definiere zu $\gamma \in \Pi^k(X, x)$ den Weg

$$\tilde{\gamma}(t) := \begin{cases} \zeta(1 - 3t) & t \leq \frac{1}{3} \\ \gamma(3t - 1) & \frac{1}{3} < t \leq \frac{2}{3} \\ \zeta(3t - 2) & \frac{2}{3} < t \end{cases}. \quad (\text{B.11})$$

Dieser Weg ist stetig, da $\zeta(0) = \gamma(0) = \gamma(1) = \zeta(0) = x$, und es gilt $\tilde{\gamma}(0) = \tilde{\gamma}(1) = y$, d.h. $\tilde{\gamma} \in \Pi^k(X, y)$.

Wir zeigen nun, dass sich die Abbildung $\Pi^k(X, x) \rightarrow \Pi^k(X, y), \gamma \mapsto \tilde{\gamma}$ auch auf Äquivalenzklassen definieren lässt. Seien dazu $\gamma_1, \gamma_2 \in \Pi(X, x)$ k -homotop und sei ϕ eine Homotopie dazwischen.

Definiere nun

$$\tilde{\phi}(s, t) := \begin{cases} \zeta(1 - 3t) & t \leq \frac{1}{3} \\ \phi(s, 3t - 1) & \frac{1}{3} < t \leq \frac{2}{3} \\ \zeta(3t - 2) & \frac{2}{3} < t \end{cases}. \quad (\text{B.12})$$

Dies ist eine k -Homotopie zwischen $\tilde{\gamma}_1$ und $\tilde{\gamma}_2$. Mit dem Homomorphiesatz lässt sich dies zu einer Abbildung zwischen $\pi_1^k(X, x)$ und $\pi_1^k(X, y)$ liften. Da durch umgekehrtes Durchfahren der Kurve ζ eine Abbildung erzeugt wird, die dazu invers ist, ist die Abbildung bijektiv. Ferner ist es leicht zu sehen, dass die Abbildung die Gruppenstruktur erhält. Somit ist $\pi_1^k(X, x) \cong \pi_1^k(X, y)$. \square

B.0.6 Bemerkung: Innerhalb einer glatten Mannigfaltigkeit, bei der sich jedes Paar von Punkten durch einen stückweise k -mal stetig differenzierbaren Weg

verbinden lässt, sind also für jedes Paar von Punkten die fundamentalen Gruppen in diesen Punkten isomorph. Somit hängt die Struktur von $\pi_1^k(X, x)$ nicht mehr vom Punkt x ab. Daher spricht man oft auch nur von $\pi_1^k(X)$, der (ersten) Fundamentalgruppe von X .

B.0.7 Beispiel: Ein klassisches Beispiel für Fundamentalgruppen ist die freie Gruppe aus n Symbolen für glatte Mannigfaltigkeiten mit n „Löchern“, wobei jedem Loch ein Symbol zugeordnet wird, sodass jede Windung um dieses Loch durch dieses Symbol repräsentiert wird. Hier hängt die Fundamentalgruppe in der Regel auch nicht von k ab.

Ferner kommt auch $C_2 = \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ vor, als Fundamentalgruppe der Mannigfaltigkeit $SO(n)$ ($n \geq 3$).

Literatur

- [ALV91] D.V. Alekseevskij, V.V. Lychagin und A.M. Vinogradov. *Geometry I*. Hrsg. von R.V. Gamkrelidze. Encyclopaedia of Mathematical Sciences. Springer-Verlag, 1991.
- [Ber84] M.V. Berry. „Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes“. In: *Proceedings of the Royal Society A* 392 (1984), S. 45–57.
- [KN63] S. Kobayashi und K. Nomizu. *Foundations of Differential Geometry*. Bd. I. Interscience Tracts in Pure and Applied Mathematics 15. Interscience Publisher, 1963.
- [RB17] M. Russ und G. Burkard. „Three-Electron Spin Qubits“. In: *Journal of Physics; Condensed Matter* 29.39 (2017).
- [Sag19] Sage Foundation. *SageMath*. Version 8.7. 23. März 2019. URL: <https://www.sagemath.org>.
- [Sim83] B. Simon. „Holonomy, the Quantum Adiabatic Theorem, and Berry’s Phase“. In: *Physical Review Letters* 51 (1983), S. 2167–2170.
- [SW89] A. Shapere und F. Wilczek, Hrsg. *Geometric Phases in Physics*. Advanced Series in Mathematical Physics. World Scientific, 1989.
- [WZ84] F. Wilczek und A. Zee. „Appearance of Gauge Structure in Simple Dynamical Systems“. In: *Physical Review Letters* 52 (1984), S. 2111–2114.