Aproximação Adiabática

Aula 17

Um processo adiabático é caracterizado por uma variação temporal T_a tal que os tempos característicos do sistema, T_i, satisfazem

$$T_i \ll T_a$$

Num processo adiabático podemos assumir que se a variação temporal dos parâmetros é devagar, podemos resolver o problema ignorando essa dependência (caracterizada por T_a) para depois considerá-la no fim.
Por exemplo, um pêndulo simples de massa m tem um período

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{L}{g}}$$

onde L é o comprimento. Se agora permitimos $L = L(t)$ mas a variação de L é caracterizada pelo tempo T_a, eg.

$$\frac{1}{L}\frac{dL}{dt} \cdot T \ll 1$$

$\Rightarrow$ Podemos usar $T(t) = 2\pi \sqrt{\frac{L(t)}{g}}$

O significado aqui é um pouco diferente do que na termodinâmica! MAS o ponto crucial para nós será o tempo característico que permite resolver o problema quase-estaticamente.

Processos Adiabáticos na Mecânica Quântica

Na MQ a aproximação adiabática pode ser estabelecida na forma do **Teorema Adiabático**. Suponhamos que temos um sistema descrito pelo hamiltoniano H^i com um espectro discreto de autoestados

$$H^i \longrightarrow \{|m^i\rangle\}$$

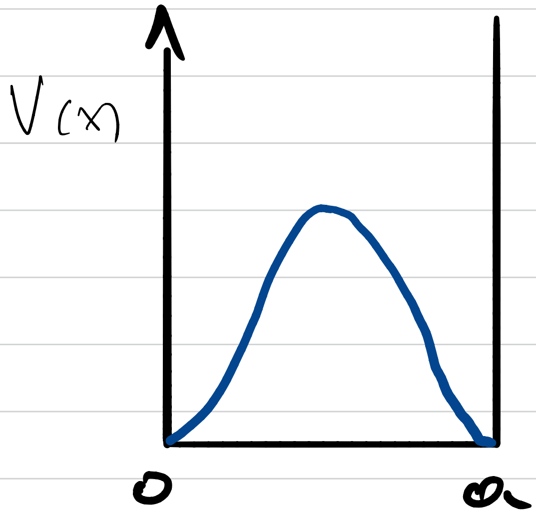
$$\Big\downarrow \text{processo adiabático}$$

$$H^f \longrightarrow \{|m^f\rangle\}$$

Se começamos no $|m^i\rangle$, o processo adiabático (e a equação de Schrödinger) asseguram que o sistema passará ao estado $|m^f\rangle$, que é o $|m\rangle$ autoestado de H^f.

$$\underset{\text{de } H^i}{|m\rangle} \xrightarrow[\text{adiabático}]{\text{processo}} \underset{\text{de } H^f}{|m\rangle}$$

Exemplo: Autoestados de um poço de potencial infinito de comprimento a



$$\psi^{i}_{(x)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{a} x\right)$$

corresponde a $n = 1$

Se agora mexemos a parede da direita do

$$a \to 2a$$

de forma adiabática, em cada momento do processo teremos um autoestado que é o estado fundamental $n=1$ do hamiltoniano com um poço de potencial de comprimento

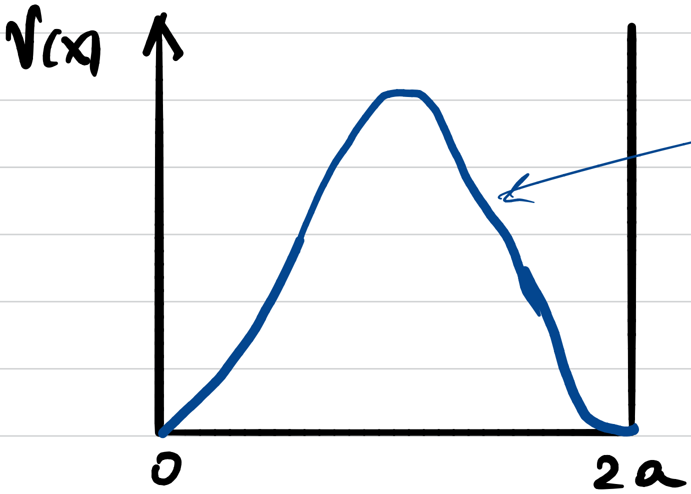
$$a \leq b \leq 2a$$

$$\Rightarrow \quad \psi^{b}_{(x)} = \sqrt{\frac{2}{b}} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{b} x\right)$$

Em particular, quando chegamos a $b = 2a$ teremos

$$\psi^{f}_{(x)} = \sqrt{\frac{1}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{2a} x\right)$$

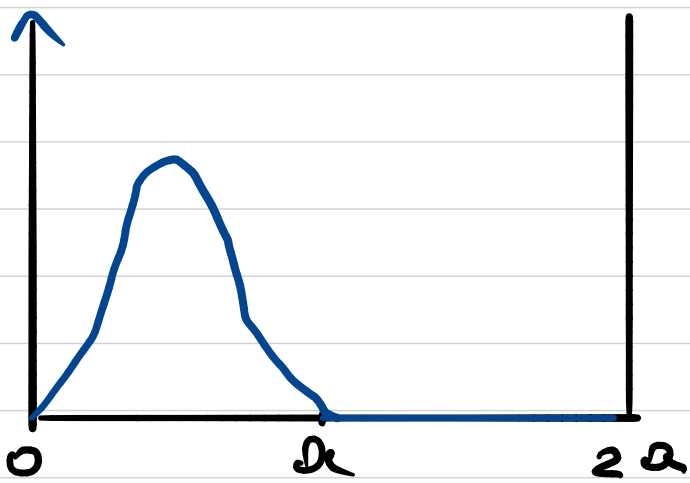
Vemos que $\psi^f_{(x)}$ é o estado fundamental $n=1$ do poço de potencial de comprimento $2a$, tal que



$$\psi^f_{(x)} = \sqrt{\frac{1}{a}}\, \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{2a} x\right)$$

A aproximação adiabática não corresponde a uma perturbação, dado que a mudança no hamiltoniano, $H^i \to H^f$, não é pequena. O ponto é que a mudança acontece devagar.

Por outra parte, se a expansão $a \to 2a$ fosse "rápida" (e.g.: instantânea) a função de onda depois da expansão ainda seria $\psi^i_{(x)}$:



$$\psi^f_{(x)} = \psi^i_{(x)}$$

mas nesse caso $\psi^f_{(x)}$ não é um auto-estado de H^f com o poço de potencial de comprimento $2a$, e muito menos é o estado fundamental $n=1$.

Teorema Adiabático - Prova

Partimos de um hamiltoniano H independente de t, satisfazendo

$$H\,|\psi_n\rangle = E_n\,|\psi_n\rangle$$

Então se uma partícula começa no auto estado $|\psi_n\rangle$, dado que ele é um <u>estado estacionário</u>, ela continua nesse estado depois de um tempo t, tal que

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iE_n/\hbar\, t}\,|\psi_n\rangle$$

$\Rightarrow$ só difere do estado inicial por uma fase.

Se agora considerarmos um hamiltoniano que depende explicitamente de t, então tanto os autoestados como os autovalores também dependerão de t:

$$\boxed{H(t)\,|\psi_n(t)\rangle = E_n(t)\,|\psi_n(t)\rangle}$$

Mas, $\forall t$, ainda se satisfaz

$$\langle \psi_n(t) | \psi_m(t) \rangle = \delta_{nm}$$

$\Rightarrow$ os autoestados $|\psi_n(t)\rangle$ formam uma base ortonormal de autoestados de $H(t)$. Portanto, a solução mais geral da equação de Schrödinger

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = H(t) |\Psi(t)\rangle \right\}$$

pode ser expandida nesta base:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n b_n(t) |\psi_n(t)\rangle$$

Por conveniência redefinimos os coeficientes $b_n(t)$ tal que

$$\left[|\Psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) e^{i\theta_n(t)} |\psi_n(t)\rangle \right]$$

onde definimos

$$\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t')\, dt'$$

Com essa definição, vemos que quando $E_n(t)$ é constante (i.e. $H(t) = H =$ constante) recuperamos a expressão correta. Substituindo essa expressão na equação de Schrödinger para a evolução temporal de $|\Psi(t)\rangle$, obtemos

$$\boxed{i\hbar \sum_m \left\{ \frac{\partial c_m}{\partial t} |\psi_m\rangle + c_m \frac{\partial |\psi_m\rangle}{\partial t} + i c_m |\psi_m\rangle \frac{\partial \theta_m}{\partial t} \right\} e^{i\theta_m} = \sum_m c_m(t) H(t) |\psi_m(t)\rangle e^{i\theta_m(t)}}$$

Mas

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial \theta_m(t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{1}{\hbar}\right) \int_0^t E_m(t')\, dt \\ &= -\frac{1}{\hbar} E_m(t) \end{aligned} \right\}$$

e, do lado direito

$$\sum_m c_m(t) H(t) |\psi_m(t)\rangle e^{i\theta_m(t)}$$

$$= \sum_m c_m(t) E_m(t) |\psi_m(t)\rangle e^{i\theta_m(t)}$$

⇒ o 3º termo da esquerda cancela o termo da direita e obtemos a seguinte equação diferencial:

$$\sum_m \frac{\partial c_m}{\partial t} |\psi_m\rangle e^{i\theta_m} = -\sum_m c_m \frac{\partial |\psi_m\rangle}{\partial t} e^{i\theta_m}$$

Se multiplicamos os dois lados com $\langle \psi_m(t)|$:

$$\frac{\partial c_m(t)}{\partial t} e^{i\theta_m(t)} = -\sum_n c_n(t) \langle \psi_m(t)|\dot{\psi}_n(t)\rangle e^{i\theta_n(t)}$$

onde $|\dot{\psi}_n(t)\rangle \equiv \frac{\partial}{\partial t}|\psi_n(t)\rangle$

Então chegamos à equação

$$\boxed{\dot{c}_m(t) = -\sum_n c_n(t) \langle \psi_m(t)|\dot{\psi}_n(t)\rangle e^{i(\theta_n-\theta_m)}}$$

Para avançar precisamos de entender o produto $\langle \psi_m(t)|\dot{\psi}_n(t)\rangle$. Para isso voltamos à equação de Schrödinger para autovalores e autoestados dependentes do tempo:

$$H(t)|\psi_n(t)\rangle = E_n(t)|\psi_n(t)\rangle$$

Se tomamos a derivada temporal em ambos lados (usando a notação $\dot{} = \frac{\partial}{\partial t}$)

temos que

$$\dot{H}|\psi_n\rangle + H|\dot{\psi}_n\rangle = \dot{E}_n|\psi_n\rangle + E_n|\dot{\psi}_n\rangle$$

Novamente, multiplicando os dois lados por $\langle\psi_m^{(t)}|$

$$\left.\begin{aligned}&\langle\psi_m|\dot{H}|\psi_n\rangle + \langle\psi_m|H|\dot{\psi}_n\rangle \\ &\quad = \dot{E}_n\delta_{mn} + E_n\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle\end{aligned}\right\}$$

$$\Rightarrow \left\{\begin{aligned}&\langle\psi_m|\dot{H}|\psi_n\rangle + E_m\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle \\ &\quad = \dot{E}_n\delta_{mn} + E_n\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle\end{aligned}\right\}$$

$\Rightarrow$ quando $m \neq n$ temos que

$$\langle\psi_m|\dot{H}|\psi_n\rangle = (E_n - E_m)\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle$$

ou,

$$\boxed{\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle = \frac{\langle\psi_m|\dot{H}|\psi_n\rangle}{E_n - E_m}, \quad m \neq n}$$

Substituindo na expressão para $\dot{C}_m(t)$:

$$\boxed{\dot{C}_m(t) = -C_m\langle\psi_m|\dot{\psi}_m\rangle - \sum_{n\neq m} C_n\frac{\langle\psi_m|\dot{H}|\psi_n\rangle}{E_n - E_m}e^{i(\theta_n - \theta_m)}}$$

onde separamos explicitamente o termo com $m = n$. Até aqui, esse resultado é exato. Não temos feito aproximação nenhuma.

A aproximação adiabática corresponde a assumir que os termos vindo de $\dot{H}$ são muito pequenos, ou que

$$\langle \psi_m | \dot{H} | \psi_n \rangle << (E_n - E_m), \quad m \neq n$$

Então, a aproximação adiabática corresponde a escrever

$$\boxed{\dot{c}_m(t) = - c_m(t) \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle}$$

Integrando essa equação diferencial temos

$$\frac{dc_m}{c_m} = - \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle dt$$

$$\Rightarrow \left\{ c_m(t) = c_m(0)\, e^{-\int_0^t \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle dt'} \right.$$

Mas $\langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle$ é puramente imaginário. Para ver isso partimos de $\frac{d \langle \psi_m | \psi_m \rangle}{dt} = 0. \Rightarrow$

$$\Rightarrow \quad 0 = \langle \dot{\psi}_m | \psi_m \rangle + \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle$$

$$\Rightarrow \quad 0 = \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle^* + \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{0 = 2\,\mathrm{Re}\left[\langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle\right]}$$

Então se definimos o parametro real

$$\left\{ \gamma_m(t) \equiv i \int_0^t \langle \psi_m(t') | \dot{\psi}_m(t') \rangle \, dt' \right\}$$

então temos que

$$\left\{ C_m(t) = C_m(0)\, e^{i\gamma_m(t)} \right\}$$

o que resulta em

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n C_n(0)\, e^{i\gamma_n(t)}\, e^{i\theta_n(t)}\, |\psi_n(t)\rangle$$

Então, se para $t=0$ o sistema está no autoestado n $|\psi_n\rangle = |\psi_n(0)\rangle$, temos que

$$C_n(0) = 1 \,, \quad e \quad C_m(0) = 0 \quad \forall m \neq n$$

$$\Rightarrow \boxed{|\Psi(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)}\, e^{i\theta_n(t)}\, |\psi_n(t)\rangle}$$

$\Rightarrow$ o sistema ainda está no autoestado n

do hamiltoniano $H(t)$, com a única diferença que tem um par de fatores de fase:

$$e^{i\theta_n(t)} \quad e \quad e^{i\gamma_n(t)}$$

$\theta_n(t)$ é só a generalização da fase

$$e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$

para o caso de $H(t)$. $\theta_n(t)$ é chamada de fase dinâmica, e depende de $H(t)$ e do tempo transcorrido.

A fase $\gamma_n(t)$, como veremos, é uma fase geométrica e é a chamada fase de Berry.