AULA 18

FASE GEOMÉTRICA

Tínhamos visto que

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t \left\langle \psi_n(t') \middle| \frac{\partial \psi_n(t')}{\partial t'} \right\rangle dt'$$

é uma fase que aparece devido à evolução adiabática, além da fase dinâmica $\theta_n(t)$ associada à evolução temporal do sistema. Em geral, a dependência temporal dos autoestados $|\psi_n(t)\rangle$ aparece porque tem algum parâmetro no hamiltoniano, $R(t)$, que depende do tempo.

Como veremos esse parâmetro ou parâmetros, podem ser as componentes de um campo magnético, ou outros parâmetros. Estamos interessados nos casos nos quais as fases $\gamma_n(t)$ são não triviais. Isto quer dizer que em algumas situações físicas a fase $\gamma_n(t)$ terá significado físico. De fato pode ser observada experimentalmente.

Então de fato temos que

$$\frac{\partial \Psi_n(t)}{\partial t} = \frac{\partial \Psi_n}{\partial R}\,\frac{dR}{dt}$$

o que resulta em

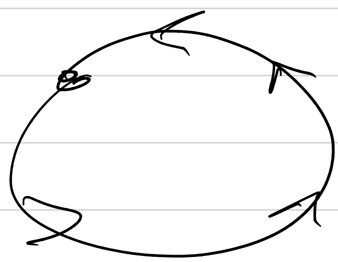
$$\gamma_n(t) = i\int_0^t \left\langle \Psi_n \middle| \frac{\partial \Psi}{\partial R}\right\rangle \frac{dR}{dt'}\,dt'$$

ou

$$\left\{\gamma_n(t) = i\int_{R_i}^{R_f} \left\langle \Psi_n \middle| \frac{\partial \Psi_n}{\partial R}\right\rangle dR\right\}$$

Estamos interessados em saber o que acontece se o processo adiabático retorna no fim ao Hamiltoniano original. Neste caso, isto quer dizer

$$R_f = R_i$$



processo adiabático cíclico. Tempo do ciclo: T

$$\Rightarrow \left\{\gamma_n(T) = 0\right\}$$

Mas nem sempre esse é o caso.

Quando $\gamma_m(T) \neq 0$ o sistema é chamado de não-holonômico.

No caso acima tínhamos assumido que só tem um parâmetro no hamiltoniano que depende do tempo. Mas se existem vários, temos que

$$R_1(t), R_2(t), \ldots, R_N(t)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \psi_m}{\partial t} = \frac{\partial \psi_m}{\partial R_1}\frac{dR_1}{dt} + \ldots + \frac{\partial \psi_m}{\partial R_N}\frac{dR_N}{dt}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\partial \psi_m}{\partial t} = \vec{\nabla}_R \psi_m \cdot \frac{d\vec{R}}{dt}}$$

onde definimos $\vec{R}(t) = (R_1(t), R_2(t), \ldots, R_N(t))$ e $\vec{\nabla}_R$ é o gradiente no espaço desses parâmetros. Agora obtemos que a fase geométrica é

$$\gamma_m(t) = i\int_{\vec{R}_i}^{\vec{R}_f} \langle \psi_m | \vec{\nabla}_R \psi_m \rangle \cdot d\vec{R}$$

Se agora consideramos a situação na qual o hamiltoniano volta a sua forma inicial depois de um tempo T, temos uma expressão para a fase geométrica dada por

$$\boxed{\gamma_m(T) = i\oint \langle \psi_m | \vec{\nabla}_R \psi_m \rangle \cdot d\vec{R}}$$

Essa é a fase de Berry. Ela é chamada de fase geométrica dado que depende só da trajetória (no espaço de parâmetros).
O ponto central é que se o hamiltoniano faz uma trajetória fechada (adiabática) a fase geométrica é sim um observável físico.

Relevância Física

Em princípio, $\gamma_m(t)$ não tem significado físico. A razão é que os autoestados podem ser redefinidos por uma fase arbitrária tal que

$$|\psi_m(\vec{R}(t))\rangle \rightarrow e^{i\alpha_m(\vec{R})} |\psi_m(\vec{R})\rangle$$

essa redefinição resulta numa mudança em $\gamma_m(t)$ de acordo com

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_m C_m(0)\, e^{i\gamma_m(t)}\, e^{i\theta_m(t)}\, |\psi_m(t)\rangle$$

Mas lembrando que

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n C_n(0)\, |\psi_n(0)\rangle$$

$$\Rightarrow \quad C_n(0) = \langle \psi_n(0) | \Psi(0)\rangle$$

então uma mudança do tipo

$$|\psi_n(t)\rangle \to e^{i\alpha_n(t)}\, |\psi_n(t)\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \left\{ C_n(0) \to e^{-i\alpha_n(0)}\, C_n(0) \right\}$$

E a mudança em $\gamma_n(t)$ é

$$\gamma_n(t) \to \boxed{\tilde{\gamma}_n(t) = \gamma_n(t) + \alpha_n(t) - \alpha_n(0)}$$

o que não afeta a física dado que agora $|\Psi(t)\rangle$ depende dos $\tilde{\gamma}_n(t)$. Portanto os $\gamma_n(t)$ não tem por si sós significado físico. De fato podemos definir transformações arbitrárias $\alpha_n(t)$ tal que

$$\gamma_n(t) \to \tilde{\gamma}_n(t) = 0$$

e eliminar totalmente essas fases. O que sim tem significado físico são classes de γ_n (classes de equivalência) definidas como conjuntos de γ_n's relacionados por essas transformações.

Em geral, essas classes são não triviais, i.e. não sempre é possível eliminar $\gamma_n(t)$ por uma fase nos autoestados. Para identificar esses casos NÃO Triviais é bom considerar um ciclo que começa em $t=0$ e que termina no mesmo ponto do espaço de parâmetros num tempo posterior T.

É obvio que essa fase $\gamma_n(T)$ é independente de possíveis transformações de fases sofridas pelos autoestados $|\psi_n(t)\rangle$

$$\gamma_n(T) \longrightarrow \gamma_n(T) + \alpha_n(T) - \alpha_n(0)$$

mas $\alpha_n(T) = \alpha_n(0)$ por definição.
Em particular, concluimos que se as transformações de fase

$$|\psi_n(t)\rangle \to e^{i\alpha_n(t)}|\psi_n(t)\rangle$$

podem ser usados para zerar $\gamma_n(t)$ então

$$\gamma_n(T) = 0.$$

Se a trajetória fechada no espaço de parâmetros é $C(T)$, então a fase de Berry é definida como

$$\gamma_n(C)$$

e define a classe de fases (em alguns casos não triviais, i.e. não nulos).

Para calcular a fase de Berry num exemplo onde ela é não trivial, voltamos a expressão

$$\gamma_n(C) = i \oint_C \langle \psi_n | \vec{\nabla}_R \psi_n \rangle \cdot d\vec{R}$$

onde substituimos o tempo T que leva completar o ciclo ($\vec{R}_f(T) = \vec{R}_i$), por C para denotar a curva fechada C(T) descrita na integral de linha.
Usando o Teorema de Stokes, podemos escrever

$$\gamma_n(C) = i \iint_{S(C)} \vec{\nabla}_R \times \left(\langle \psi_n | \vec{\nabla}_R \psi_n \rangle \right) \cdot d\vec{S}$$

Mas dado que sabemos que $\langle \psi_n | \vec{\nabla}_R \psi_n \rangle$ é puramente imaginário, podemos escrever

$$\gamma_n(C) = - \iint_{S(C)} \mathrm{Im}\left[\vec{\nabla}_R \times \left(\langle \psi_n | \vec{\nabla}_R \psi_n \rangle \right) \right] \cdot d\vec{S}$$

Se agora definimos o vetor

$$\vec{V}_n(\vec{R}) = \mathrm{Im}\left[\vec{\nabla}_R \times \left(\langle \psi_n | \vec{\nabla}_R \psi_n \rangle \right) \right]$$

temos que

$$\gamma_n(C) = - \iint_{S(C)} \vec{V}_n(\vec{R}) \cdot d\vec{S}$$

Usando a identidade

$$\vec{\nabla}\times\left(f(x)\,\vec{\nabla}g(x)\right)=\left(\vec{\nabla}f(x)\right)\times\left(\vec{\nabla}g(x)\right)$$

obtemos

$$\vec{V}_n(\vec{R})=\mathrm{Im}\left[\langle\vec{\nabla}_R\psi_n|\times|\vec{\nabla}_R\psi_n\rangle\right]$$

Inserindo a identidade como

$$\sum_m|\psi_m\rangle\langle\psi_m|=\mathbb{1}$$

$$\Rightarrow\vec{V}_n(\vec{R})=\mathrm{Im}\left[\sum_m\langle\vec{\nabla}_R\psi_n|\psi_m\rangle\times\langle\psi_m|\vec{\nabla}_R\psi_n\rangle\right]$$

Mas sabemos que para $m=n$

$\langle\psi_n|\vec{\nabla}_R\psi_n\rangle$ é puramente imaginário

$\Rightarrow$ esse termo não contribui à soma.

Chegamos a que

$$\boxed{\vec{V}_n(\vec{R})=\mathrm{Im}\left[\sum_{m\neq n}\langle\vec{\nabla}_R\psi_n|\psi_m\rangle\times\langle\psi_m|\vec{\nabla}_R\psi_n\rangle\right]}$$

Mas essa expressão pode ser escrita de forma que não precisemos derivadas dos autoestados $|\psi_n\rangle$. Para isso, começamos com a equação de Schrödinger escrita como:

$$H(\vec{R})\,|\psi_n(\vec{R})\rangle = E_n(\vec{R})\,|\psi_n(\vec{R})\rangle$$

onde usamos o fato que a dependência temporal é através dos parametros $\vec{R}$. Se agora diferenciamos ambos lados, i.e. aplicamos o operador diferencial $\vec{\nabla}_R$, obtemos

$$\left(\vec{\nabla}_R H(\vec{R})\right)|\psi_n(\vec{R})\rangle + H(\vec{R})\vec{\nabla}_R|\psi_n(\vec{R})\rangle$$
$$= \left(\vec{\nabla}_R E_n(\vec{R})\right)|\psi_n(\vec{R})\rangle + E_n(\vec{R})\vec{\nabla}_R|\psi_n(\vec{R})\rangle$$

Se agora multiplicamos por $\langle\psi_m(\vec{R})|$, temos (omitindo o argumento $\vec{R}$ por simplicidade de notação)

$$\langle\psi_m|\vec{\nabla}_R H|\psi_n\rangle + E_m\langle\psi_m|\vec{\nabla}_R\psi_n\rangle =$$
$$(\vec{\nabla}_R E_n(\vec{R}))\langle\psi_m|\psi_n\rangle + E_n\langle\psi_m|\vec{\nabla}_R\psi_n\rangle$$

Mas dado que estamos interessados no caso $m \neq n$ chegamos à relação

$$\boxed{\langle\psi_m|\vec{\nabla}_R\psi_n\rangle = \frac{\langle\psi_m|\vec{\nabla}_R H|\psi_n\rangle}{E_n - E_m}}$$

para $m \neq n$. Substituindo na expressão para $\vec{\gamma}_n(\vec{R})$ obtemos

$$\vec{V}_m(\vec{R}) = \mathrm{Im}\left[\sum_{m\neq n} \frac{\langle \psi_n|\vec{\nabla}_R H|\psi_m\rangle \times \langle \psi_m|\vec{\nabla}_R H|\psi_n\rangle}{(E_m - E_n)^2}\right]$$

Dado que

$$\gamma_n(C) = -\iint_{S(C)} \vec{V}_n \cdot d\vec{S}$$

e $\vec{V}_n$ está agora expressado em termos de elementos de matriz dos gradientes do hamiltoniano no espaço de parâmetros, podemos usar essa expressão para calcular a fase de Berry em casos nos quais ela é não trivial.

Exemplo: Spin em presença de um campo magnético lentamente variável

O hamiltoniano de interesse é

$$H(\vec{B}) = -\frac{q}{mc}\,\vec{S}\cdot\vec{B} \equiv k\,\vec{S}\cdot\vec{B}$$

onde definimos a constante k por conveniência e o campo magnético varia lentamente com o tempo, e portanto as suas componentes são os parâmetros $R_1(t)$, $R_2(t)$ e $R_3(t)$. I.E.

$$\vec{R}(t) = \vec{B}(t)$$

Se considerarmos que $\vec{B} = B\,\hat{z}$

Temos que

$$H(\vec{B}) = \kappa B S_z + H^0$$

onde adicionamos o termo H^0 é independente do $\vec{B}$
Os autoestados são

$\{|\psi_n(\vec{B})\rangle\}$ e satisfazem

$$H^0 |\psi_n\rangle = E_n^0 |\psi_n\rangle$$

e

$$\left\{ \begin{array}{l} S_z |\psi_n\rangle = \hbar m_s |\psi_n\rangle \\ S^2 |\psi_n\rangle = \hbar^2 s(s+1) |\psi_n\rangle \end{array} \right\}$$

onde as duas últimas igualdades resultam do fato de H^0 comutar com S_z e S^2 e, portanto seus autoestados são também autoestados de S_z e S^2. Aqui m_s é o autovalor de S_z ($/\hbar$)
Então temos que

$$\left[E_{m_s}(\vec{B}) = \kappa B \hbar m_s + E_n^0 \right]$$

Mas na expressão para $\vec{V}_n(\vec{B})$, o denominador é o quadrado de

$$E_{m_s'} - E_{m_s} = \kappa B \hbar (m_s' - m_s)$$

independente dos autovalores de H^0, E_n^0.
Portanto, podemos nos referir aos auto-estados de H pelos índices m_s.

E.g.: $|\psi_n(\vec{B})\rangle \longrightarrow |\psi_{m_s}\rangle$

Também precisamos calcular $\vec{\nabla}_R H(\vec{R})$.
Neste caso é

$$\boxed{\vec{\nabla}_B H(\vec{B}) = \kappa \vec{S}}$$

Então $\vec{V}_n(\vec{B})$ aqui será $\vec{V}_{m_s}(\vec{B})$:

$$\vec{V}_{m_s}(\vec{B}) = \frac{1}{\hbar^2 B^2} \operatorname{Im}\left[\sum_{m_s' \neq m_s} \frac{\langle \psi_{m_s}|\vec{S}|\psi_{m_s'}\rangle \times \langle \psi_{m_s'}|\vec{S}|\psi_{m_s}\rangle}{(m_s' - m_s)^2}\right]$$

onde vemos que $\vec{V}_{m_s}$ não depende de κ.
Devido ao fato que os autoestados $|\psi_{m_s}\rangle$ são obviamente autoestados de S_z, vemos que, dado que $m_s' \neq m_s$, os únicos elementos de matriz não nulos na soma são

$$\langle \psi_{m_s}|S_x|\psi_{m_s'}\rangle \quad e \quad \langle \psi_{m_s}|S_y|\psi_{m_s'}\rangle$$

mas eles são não nulos só se

$$\boxed{m_s' = m_s \pm 1}$$

Consequências:

- No denominador temos $(m_s' - m_s)^2 = 1$
- A soma terá dois termos $\hat{x} \times \hat{y} = \hat{z}$ e $\hat{y} \times \hat{x} = -\hat{z}$

Portanto o vetor $\vec{V}_{m_s}(\vec{B})$ é na direção $\hat{z}$.
Em particular,

$$\langle \psi_{m\pm 1} | S_x | \psi_m \rangle = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(s\mp m)(s\pm m+1)}$$

$$\langle \psi_{m\pm 1} | S_y | \psi_m \rangle = \mp \frac{i\hbar}{2}\sqrt{(s\mp m)(s\pm m+1)}$$

onde omitimos a partir de agora o subíndice "s" de m_s ($m_s \longrightarrow m$) para simplificar a notação. Multiplicando os dois obtemos

$$\langle \psi_m | S_x | \psi_{m\pm 1} \rangle \langle \psi_{m\pm 1} | S_y | \psi_m \rangle$$

$$= \mp\frac{i\hbar^2}{4}\left(\frac{1}{2}\mp m\right)\left(\frac{1}{2}\pm m+1\right)$$

Mas precisamos somar os 2 termos

$$\frac{i\hbar^2}{4}\left\{-m^2+m^2+\frac{3}{2}m-\frac{m}{2}+\frac{3}{2}m-\frac{m}{2}+\frac{3}{4}-\frac{3}{4}\right\}$$

$$= \frac{i\hbar^2}{2}m$$

Mas esse é o termo $S_x S_y (\hat{x} \times \hat{y})$

$$\Rightarrow \frac{i\hbar^2}{2} m \hat{z}$$

Também precisamos

$$\underbrace{\langle S_y \rangle \langle S_x \rangle}_{-\frac{i\hbar^2}{2} m} \underbrace{\hat{y} \times \hat{x}}_{(-\hat{z})} = \frac{i\hbar^2}{2} m \hat{z}$$

onde o primeiro final vem de calcular

$$\langle \psi_m | S_y | \psi_{m\pm1} \rangle \langle \psi_{m\pm1} | S_x | \psi_m \rangle$$

$$= \langle \psi_{m\pm1} | S_y | \psi_m \rangle^* \langle \psi_{m\pm1} | S_x | \psi_m \rangle$$

Somando os dois termos obtemos

$$\boxed{\vec{V}_m(\vec{B}) = \frac{m}{B^2} \hat{z}}$$

ou

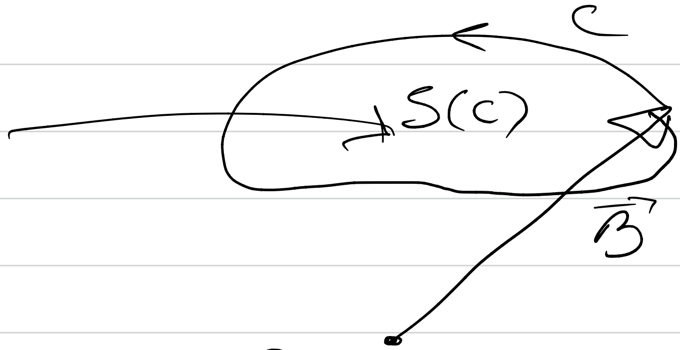
$$\boxed{\vec{V}_m(\vec{B}) = \frac{m \vec{B}}{B^3}}$$

Finalmente, para calcular a fase de Berry precisamos fazer a integral

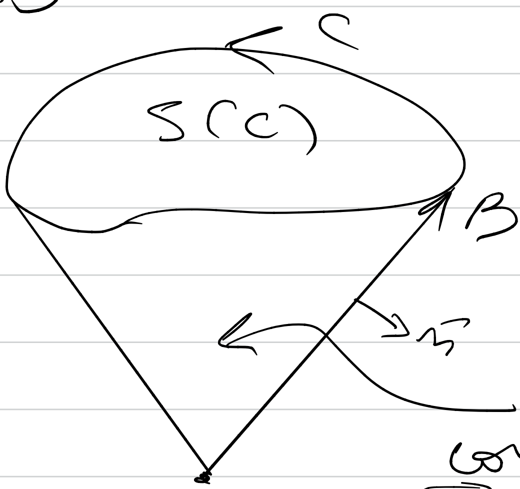
$$\gamma_m(C) = -\iint_{S(C)} \vec{V}_m(\vec{R}) \cdot d\vec{S}$$

No nosso caso, $\vec{R} = \vec{B}$

portanto temos



i.e. o vetor $\vec{B}$ descreve a curva C fechada. O espaço dos parâmetros é definido pelas componentes de $\vec{B}$. Em princípio, a superfície S(C) é definida dentro da curva C. Porém, podemos fazer uso do seguinte truque para fazer a integral. Vamos considerar a superfície do cone descrito pelo vetor $\vec{B}$:



Superfície do cone definido por $\vec{B}$ quando ele faz o ciclo que resulta em C.

Vemos que o diferencial de área na superfície do cone é

$$dS\ \hat{n}\cdot\vec{B} = 0$$ dado que por definição a normal no cone é perpendicular a $\vec{B}$!!

$\Rightarrow$ Podemos incluir a área do cone na integral sem que isso faça nenhuma diferença.

$$\tilde{S} = S(C) + S_{cone}$$

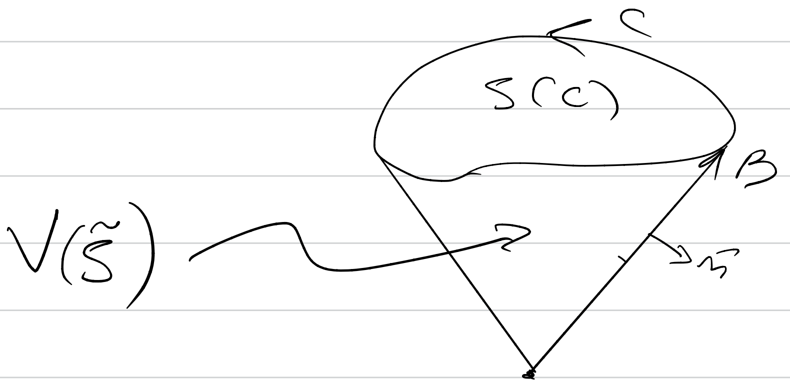
$$\Rightarrow \gamma_m(C) = -\iint_{\tilde{S}} \vec{V}_m(\vec{B})\cdot d\vec{S}$$

$$= -\iint_{S(C)} \vec{V}_m\cdot d\vec{S} - \underbrace{\iint_{S_{cone}} \vec{V}_m\cdot d\vec{S}}_{=0}$$

Mas a vantagem é que $\tilde{S}$ é uma superfície fechada, e portanto podemos usar o teorema de Gauss

$$\gamma_m(C) = -\iint_{\tilde{S}} \vec{V}_m\cdot d\vec{S} = -\int_{V(\tilde{S})} \vec{\nabla}\cdot\vec{V}_m\, dV$$

onde o volume é o que ficou dentro do cone definido por $S_{cone} + S(C)$.



$$\Rightarrow \gamma_m(C) = -m \int_{V(\tilde{S})} \vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{B}}{B^3}\, d^3B$$

onde $d^3B = B^2\, dB\, d\Omega$ é o elemento de volume no espaço definido por $\vec{B}$.
Mas (Eletro I)

$$\vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{B}}{B^3} = 4\pi\, \delta^{(3)}(\vec{B})$$

i.e. é zero em todo o espaço de parâmetros menos na origem.
Então, se a integral fosse numa esfera o resultado seria 4π. Mas no nosso caso o resultado da integral será 4π vezes a fração da esfera ocupada pelo cone

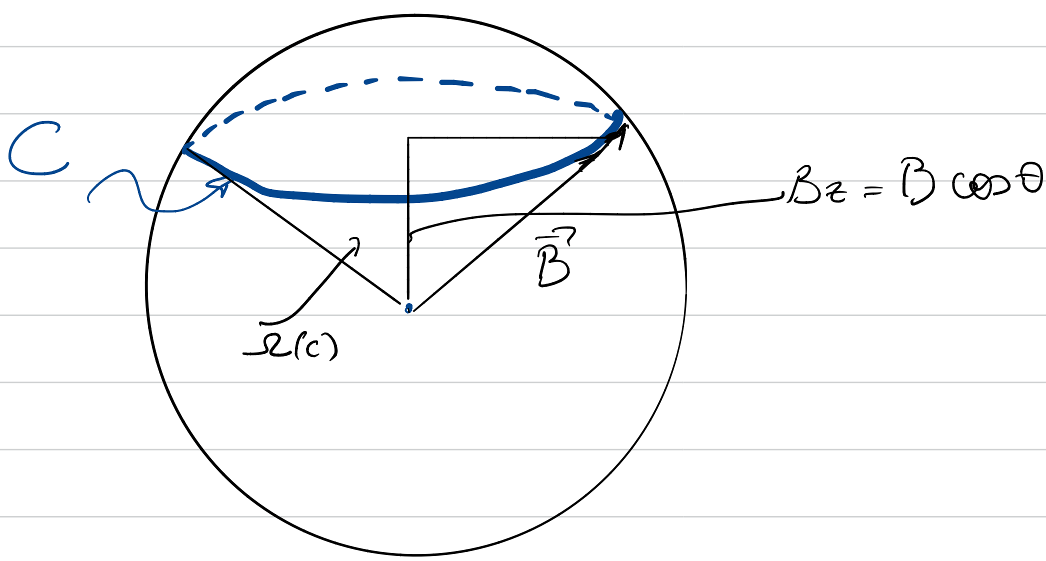
Essa fração é dada pelo ângulo sólido $\Omega(C)$ definido pela curva fechada C com a origem no espaço de $\vec{B}$, dividido por 4π (o ângulo sólido correspondente à esfera):

$$\Rightarrow \quad \gamma_m(C) = -m\,4\pi\,\frac{\Omega(C)}{4\pi}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\gamma_m(C) = -m\,\Omega(C)}$$

$\Rightarrow$ A fase de Berry é claramente não trivial e está totalmente definida pela trajetória da curva C no espaço dos parâmetros que mudam com o tempo, neste caso $\vec{B}$.

Por exemplo, consideramos o caso em que o campo magnético só muda de direção, mantendo constante portanto a sua componente z. Neste caso a curva C é um círculo



$$\gamma_m(C) = -m \int_0^{\arccos\left(\frac{B_z}{B}\right)} d\Omega$$

$$= -m \int_0^{\arccos\left(\frac{B_z}{B}\right)} 2\pi \operatorname{sen}\theta \, d\theta$$

$$= -m\, 2\pi \left[-\cos\theta\right]_0^{\arccos\left(\frac{B_z}{B}\right)}$$

$$= m\, 2\pi \left(\frac{B_z}{B} - 1\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{\gamma_m(C) = -m\, 2\pi\left(1 - \frac{B_z}{B}\right)}$$