ix) Teorema adiabático e as fases de Berry

Consideremos um sistema descrito por uma hamiltoniana H que dependa explicitamente do tempo, ou seja, $H = H(t)$. Mais ainda, vamos assumir que esta dependência temporal seja lenta, isto é, a variação temporal explícita ocorre numa escala de tempo muito maior que a escala de tempo natural do sistema, caso $H \neq H(t)$.

Vamos começar a investigar este problema introduzindo o conceito de base instantânea. Esta base é definida através da diagonalização

$$H(t)\,|\varphi_n(t)\rangle = E_n(t)\,|\varphi_n(t)\rangle \quad \text{(II.2.89)}$$

onde $\langle\varphi_m(t)\,|\varphi_n(t)\rangle = \delta_{mn}$. Note que aqui, t é tratado como um parâmetro.

Vamos agora resolver a equação dinâmica

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

dado que $|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n|\varphi_n(0)\rangle$ e que vamos decompor $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\,|\varphi_n(t)\rangle$. Queremos encontrar os $c_n(t)$.

Substituindo $|\psi(t)\rangle$ na equação de Schrödinger temos:

$$\begin{aligned} i\hbar\sum_n \frac{\partial c_n}{\partial t}|\varphi_n(t)\rangle + i\hbar\sum_n c_n\frac{\partial|\varphi_n(t)\rangle}{\partial t} &= \sum_n c_n(t)\,H(t)\,|\varphi_n(t)\rangle \\ &= \sum_n c_n(t)\,E_n(t)\,|\varphi_n(t)\rangle \end{aligned}$$

Multiplicando por $\langle\varphi_k(t)\,|$ à esquerda temos

$$i\hbar\frac{\partial c_k}{\partial t} - E_k(t)\,c_k(t) = -i\hbar\sum_n c_n(t)\,\langle\varphi_k(t)\,|\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_n(t)\rangle. \quad \text{(II.2.90)}$$

Vamos calcular $\langle\varphi_k(t)\,|\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_n(t)\rangle$.

Se $k = n$ temos $\langle\varphi_n(t)\,|\varphi_n(t)\rangle = 1$, o que implica em

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\varphi_n(t)\,|\varphi_n(t)\rangle = 0$$

ou

$$\left\{\frac{\partial\langle\varphi_n|}{\partial t}\right\}|\varphi_n\rangle + \langle\varphi_n|\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_n\rangle = 0$$

$$\Rightarrow 2\mathrm{Re}\langle\varphi_n|\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_n\rangle = 0$$

ou

$$\langle\varphi_n|\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_n\rangle = i\alpha_n; \quad \alpha_n \in \mathbb{R}$$

Já para $k \neq n$ podemos derivar $H(t)\,|\varphi_n\rangle = E_n(t)\,|\varphi_n\rangle$ em relação ao tempo

$$\frac{\partial H}{\partial t}|\varphi_n(t)\rangle + H(t)\,\frac{\partial|\varphi_n(t)\rangle}{\partial t} = \frac{\partial E_n}{\partial t}|\varphi_n\rangle + E_n(t)\,\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_n\rangle$$

Multiplicando por $\langle\varphi_k(t)\,|$ à esquerda temos

$$\langle\varphi_k(t)\,|\frac{\partial H}{\partial t}|\varphi_n(t)\rangle + \langle\varphi_k(t)\,|H(t)\,\frac{\partial|\varphi_n(t)\rangle}{\partial t} = \frac{\partial E_n}{\partial t}\langle\varphi_k|\varphi_n\rangle + E_n\langle\varphi_k(t)\,|\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_n(t)\rangle$$

ou ainda, como $k \neq n$

$$\langle\varphi_k(t)\,|\frac{\partial H}{\partial t}|\varphi_n(t)\rangle + E_k(t)\,\langle\varphi_k(t)\,|\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_n(t)\rangle = E_n(t)\,\langle\varphi_k(t)\,|\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_n(t)\rangle$$

Portanto,

$$\langle\varphi_k(t)|\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_n(t)\rangle = \frac{\langle\varphi_k(t)|\dot{H}|\varphi_n(t)\rangle}{E_n(t)-E_k(t)},$$

que levado à (II.2.90) nos permite reescrevê-la como

$$\frac{\partial c_k}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\underbrace{[E_k(t)+\hbar\alpha_k(t)]}_{f_k(t)}c_k(t) = \sum_{k\neq n}\frac{\langle\varphi_k|\dot{H}|\varphi_n\rangle}{E_n(t)-E_k(t)}c_n(t)$$

A variação muito lenta implica em

$$\frac{\langle\varphi_k|\dot{H}|\varphi_n\rangle}{E_k(t)-E_n(t)} \to 0,$$

o que nos permite resolver trivialmente a equação para $c_k(t)$, que resulta em

$$c_k(t) = c_k(0)\exp -\frac{i}{\hbar}\int_0^t f_k(t')\,dt'$$

ou ainda

$$c_k(t) = c_k(0)\exp -\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_k(t')\,dt' \;\times\; \exp i\gamma_k(t)$$

Definindo os estados adiabáticos como

$$|\widetilde{\varphi}_n(t)\rangle \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'}e^{i\gamma_n(t)}|\varphi_n(t)\rangle$$

chegamos, finalmente, a

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0)\,|\widetilde{\varphi}(t)\rangle$$

ou seja, o sistema evolui no tempo sem sofrer transições entre os estados instantâneos da hamiltoniana. Estes estados adquirem apenas fases que nos levaram a definí-los como os estados adiabáticos.

Para sistemas unidimensionais a fase $\gamma_n(t)$ é nula. Entretanto, para sistemas em $D>1$ esta fase pode ser não nula e seus efeitos muito interessantes. Essa é a chamada fase de Berry, que passaremos a estudar adiante.

A fase de Berry (M. V. Berry, Proc R. Soc. London A392 45-57 (1984))

Vamos assumir que a dependência temporal explícita de H seja devida à dependência dessa mesma hamiltoniana com respeito a um conjunto de parâmetros $R_1(t), R_2(t), \ldots$ que denotaremos $\mathbf{R}(t)$. O que iremos demonstrar é que ao traçarmos um caminho $\mathcal{C}$ nesse espaço de parâmetros, tal que $\mathbf{R}(0)=\mathbf{R}(t)$, a fase $\exp -i\int_0^t \alpha_n(t')\,dt' \neq 1$.

Para simplificar a notação chamaremos $|\varphi_n(t)\rangle$ de $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$ onde a dependência dos kets com os parâmetros $\mathbf{R}(t)$ fica explícita. Assim, podemos escrever a expressão para $\alpha_n(t)$ como

$$\alpha_n(t) = -i\langle n(\mathbf{R}(t))|\frac{\partial}{\partial t}|n(\mathbf{R}(t))\rangle = -i\langle n(\mathbf{R}(t))|\boldsymbol{\nabla} n(\mathbf{R}(t))\rangle\cdot\dot{\mathbf{R}}$$

onde usamos que

$$\frac{\partial}{\partial t}|n(\mathbf{R}(t))\rangle = \boldsymbol{\nabla}|n(\mathbf{R})\rangle\cdot\frac{\partial\mathbf{R}}{\partial t}$$

e $\boldsymbol{\nabla}$ é tomado com relação a $\mathbf{R}$.

Desta forma temos

$$\begin{aligned}\int_0^t \alpha_n(t')\,dt' &= -i\int_0^t \langle n(\mathbf{R})|\boldsymbol{\nabla} n(\mathbf{R})\rangle\cdot\dot{\mathbf{R}}(t')\,dt' \\ &= -i\oint_{\mathcal{C}}\langle n(\mathbf{R})|\boldsymbol{\nabla} n(\mathbf{R})\rangle\cdot d\mathbf{R}\equiv -\gamma_n(\mathcal{C}),\end{aligned}$$

e o expoente que buscamos fica

$$-i\int_0^t \alpha_n(t')\,dt' = -\oint_{\mathcal{C}}\langle n(\mathbf{R})|\boldsymbol{\nabla} n(\mathbf{R})\rangle\cdot d\mathbf{R}\equiv i\gamma_n(\mathcal{C}) \qquad \text{(II.2.91)}$$

Esta integral pode ainda ser escrita de outra forma se usarmos o teorema de Stokes que, se $\mathbf{R}\in\mathbb{R}^3$, nos leva a

$$\begin{aligned}\gamma_n(\mathcal{C}) &= i\oint\langle n(\mathbf{R})|\boldsymbol{\nabla} n(\mathbf{R})\rangle\cdot d\mathbf{R} \\ &= -\mathrm{Im}\oint\langle n(\mathbf{R})|\boldsymbol{\nabla} n(\mathbf{R})\rangle\cdot d\mathbf{R} \\ &\quad \text{(pois } \langle \mathrm{n}(\mathbf{R})|\boldsymbol{\nabla}\mathrm{n}(\mathbf{R})\rangle \text{ é imaginário puro)} \\ &= -\mathrm{Im}\iint \boldsymbol{\nabla}\times\langle n(\mathbf{R})|\boldsymbol{\nabla} n(\mathbf{R})\rangle\cdot d\mathbf{S} \\ &= -\mathrm{Im}\iint \langle\boldsymbol{\nabla} n(\mathbf{R})|\times|\boldsymbol{\nabla} n(\mathbf{R})\rangle\cdot d\mathbf{S} \\ &= -\mathrm{Im}\iint \sum_{m\neq n}\langle\boldsymbol{\nabla} n|m\rangle\times\langle m|\boldsymbol{\nabla} n\rangle\cdot d\mathbf{S} \qquad \text{(II.2.92)}\end{aligned}$$

onde usamos que $\langle\boldsymbol{\nabla} n|m\rangle\times\langle m|\boldsymbol{\nabla} n\rangle$ é sempre imaginário enquanto que $\langle\boldsymbol{\nabla} n|n\rangle\times\langle n|\boldsymbol{\nabla} n\rangle = 0$ porque $\langle n|\boldsymbol{\nabla} n\rangle$ é imaginário puro.

Por outro lado, $\langle m|\boldsymbol{\nabla} n\rangle$ pode ser obtido se tomarmos $\boldsymbol{\nabla}$ de

$$H(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle$$

que dá

$$\boldsymbol{\nabla} H|n(\mathbf{R})\rangle + H(\mathbf{R})\boldsymbol{\nabla}|n(\mathbf{R})\rangle = \boldsymbol{\nabla} E_n(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle + E_n(\mathbf{R})\boldsymbol{\nabla}|n(\mathbf{R})\rangle.$$

Agora, multiplicando por $\langle m(\mathbf{R})|$ à esquerda temos $(m\neq n)$

$$\begin{aligned}\langle m|\boldsymbol{\nabla} H|n\rangle + E_m(\mathbf{R})\langle m|\boldsymbol{\nabla} n\rangle &= E_n(\mathbf{R})\langle m|\boldsymbol{\nabla} n\rangle \\ \Rightarrow \langle m|\boldsymbol{\nabla} n\rangle &= \frac{\langle m|\boldsymbol{\nabla} H|n\rangle}{E_n(\mathbf{R})-E_m(\mathbf{R})},\end{aligned}$$

que levado em (II.2.92) nos dá

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = -\iint d\mathbf{S}\cdot\mathbf{V}_n(\mathbf{R})$$

onde

$$\mathbf{V}_n(\mathbf{R}) \equiv \mathrm{Im}\sum_{m\neq n}\frac{\langle n(\mathbf{R})|\boldsymbol{\nabla} H(\mathbf{R})|m(\mathbf{R})\rangle\times\langle m(\mathbf{R})|\boldsymbol{\nabla} H(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle}{[E_m(\mathbf{R})-E_n(\mathbf{R})]^2}. \qquad \text{(II.2.93)}$$

Convém notar que com a nova expressão para $\gamma_n(\mathcal{C})$ não precisamos fazer qualquer restrição ao comportamento de $|n(\mathbf{R})\rangle$ com a variação de $\mathbf{R}$. Se após efetuado o transporte ao longo de $\mathcal{C}$ temos $|n(\mathbf{R})\rangle\to e^{i\mu(\mathbf{R})}|n(\mathbf{R})\rangle$ é óbvio que $\langle n|\boldsymbol{\nabla} n\rangle\to\langle n|\boldsymbol{\nabla} n\rangle + i\nabla\mu(\mathbf{R})$. Assim sendo, $\mathrm{Im}\langle n|\boldsymbol{\nabla} n\rangle$ se comporta como um potencial vetor enquanto que o seu rotacional, $\mathbf{V}_n(\mathbf{R})$, se comporta como um campo magnético. Na realidade, pode se mostrar que $\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{V}_n(\mathbf{R}) = 0$, exceto perto de degenerescências do espectro do $H(\mathbf{R})$.

Quando a dimensão do espaço de parâmetros for maior que 3 precisamos usar a generalização apropriada do teorema de Stokes através do conceito de formas diferenciais.

Vamos, então, estudar (II.2.93) na vizinhança de uma degenerescência do espectro de H. Suponha que $\mathbf{R}$ esteja próximo do ponto $\mathbf{R}^*$ onde existe $|m(\mathbf{R}^*)\rangle$ tal que $E_m(\mathbf{R}^*) = E_n(\mathbf{R}^*)$. Desta forma a expressão para $\mathbf{V}_n(\mathbf{R})$ terá a soma dominada pelos estados $|m(\mathbf{R})\rangle$ quase degenerados com $|n(\mathbf{R})\rangle$. Por simplicidade vamos assumir que exista apenas um estado $|m(\mathbf{R})\rangle$.

Denotaremos esses estados $|+(\mathbf{R})\rangle$ e $|-(\mathbf{R})\rangle$ com energias $E_{(+)}(\mathbf{R})$ e $E_{(-)}(\mathbf{R})$ onde $E_{(+)}(\mathbf{R}) \geq E_{(-)}(\mathbf{R})$ se $\mathbf{R} \simeq \mathbf{R}^*$. Então, até 1ª ordem em $\mathbf{R} - \mathbf{R}^*$ temos

$$\mathbf{V}_{(+)}(\mathbf{R}) \approx \frac{\mathrm{Im}\langle +(\mathbf{R})|\boldsymbol{\nabla} H(\mathbf{R}^*)|-(\mathbf{R})\rangle \times \langle -(\mathbf{R})|\boldsymbol{\nabla} H(\mathbf{R}^*)|+(\mathbf{R})\rangle}{\left[E_{(+)}(\mathbf{R}) - E_{(-)}(\mathbf{R})\right]^2} \quad \text{(II.2.94)}$$

e ainda $\mathbf{V}_{(+)}(\mathbf{R}) = -\mathbf{V}_{(-)}(\mathbf{R}) \Rightarrow \gamma_{(-)}(\mathcal{C}) = -\gamma_{(+)}(\mathcal{C})$.

Efetuando uma translação nos eixos da variável $\mathbf{R}$ e de $E(\mathbf{R})$ podemos, para simplificar, fazer $\mathbf{R}^* = 0$ e $E_{(\pm)}(\mathbf{R}^*) = 0$. Como sabemos, a forma mais geral para uma hamiltoniana de um sistema de 2 níveis é

$$H(\mathbf{R}) = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{bmatrix}$$

que tem como auto valores

$$E_{(+)}(\mathbf{R}) = -E_{(-)}(\mathbf{R}) = \frac{1}{2}\left(x^2 + y^2 + z^2\right)^{1/2} = \frac{R}{2}$$
$$\Rightarrow \text{se } x = y = z = 0,\ \mathbf{R}^* = 0 \text{ e } E_{(+)} = E_{(-)} = 0$$

Tomando o $\boldsymbol{\nabla}$ de H temos $\boldsymbol{\nabla} H = \boldsymbol{\sigma}/2$ onde os σ_i são as matrizes de Pauli. Para simplificar a (II.2.94) podemos considerar $\mathbf{R}$ na direção $\hat{z}$ e depois retornar aos eixos originais. Então $\sigma_z|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle$, $\sigma_x|\pm\rangle = |\mp\rangle$ e $\sigma_y|\pm\rangle = \pm i|\mp\rangle$ e a (II.2.94) fica

$$\begin{aligned} V_{x(+)} &= \frac{\mathrm{Im}\langle +|\sigma_y|-\rangle\langle -|\sigma_z|+\rangle}{2R^2} = 0, \\ V_{y(+)} &= \frac{\mathrm{Im}\langle +|\sigma_y|-\rangle\langle -|\sigma_x|+\rangle}{2R^2} = 0, \\ V_{z(+)} &= \frac{\mathrm{Im}\langle +|\sigma_x|-\rangle\langle -|\sigma_y|+\rangle}{2R^2} = \frac{1}{2R^2}, \end{aligned}$$

que, nos eixos originais, nos dá

$$\mathbf{V}_{(\pm)}(\mathbf{R}) = \pm\frac{\mathbf{R}}{2R^3}$$

Usando esta forma de $\mathbf{V}$ em (II.2.93) teremos

$$\gamma_{(\pm)}(\mathcal{C}) = -\iint \mathbf{V}_{(\pm)} \cdot d\mathbf{S} = -\frac{\Omega\left(\mathcal{C}_{(\pm)}\right)}{2}$$

onde $\Omega\left(\mathcal{C}_{(\pm)}\right)$ é o ângulo sólido subentendido pelos contornos $\mathcal{C}_{(\pm)}$ e centrados na degenerescência $\mathbf{R}^*$,

$$\Rightarrow \exp i\gamma_{(\pm)}(\mathcal{C}) = \exp -i\frac{\Omega\left(\mathcal{C}_{(\pm)}\right)}{2}. \quad \text{(II.2.95)}$$

Portanto, o estado do sistema adquire uma fase puramente geométrica de função do transporte adiabático do sistema ao longo de um circuito no espaço de parâmetros.

Um caso particular do que vimos acima é o de um elétron ($\boldsymbol{\mu} = \mu_B\boldsymbol{\sigma}$) num campo magnético $\mathbf{B}$ com H dado por $H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$.

Note que $\mathbf{B} = \mathbf{R}$, o parâmetro vetorial a ser variado.

Assim

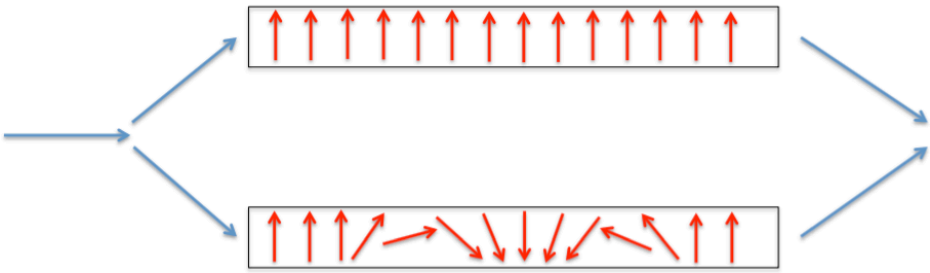
$$\mathbf{V}_{(\pm)}(\mathbf{B}) = \frac{\mathbf{B}}{2B^3}$$

e

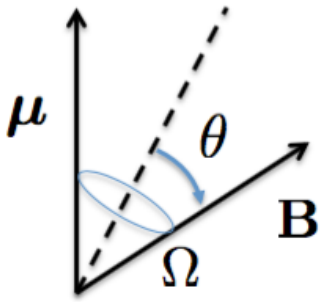
$$\exp i\gamma_{(\pm)}(\mathcal{C}) = \exp \mp\frac{i\Omega(\mathcal{C})}{2}$$

onde Ω é agora o ângulo sólido subentendido por $\mathcal{C}$ quando visto da degenerescência $\mathbf{B} = 0$. Assim, vemos que, se girarmos $\mathbf{B}$ de 2π lentamente em torno de um eixo perpendicular ao plano formado por $\boldsymbol{\mu}$ e $\mathbf{B}$, o ângulo sólido que aparece na fase será 2π o que implica no estado inicial $|\psi\rangle$ se tornar $-|\psi\rangle$.

Para detetar experimentalmente a existência desta fase poderíamos criar a seguinte situação experimental.



Devido à existência de uma fase entre os dois feixes esperamos um contraste de intensidade dado por

$$I(\theta) = \cos^2(n\pi(1-\cos\theta))$$

onde θ é o semi-ângulo do cone criado pelo movimento de $\mathbf{B}$, como mostra a figura abaixo. No caso mencionado $\theta = \pi/2$ e $n = 1/2$. Em geral, n pode ser inteiro (bósons) ou semi-inteiro (férmions).