

Hamiltonianas com dependência extrema no tempo

Trataremos agora Hamiltonianas dependentes do tempo que permitem aproximações consistentes e relativamente simples por se tratarem de casos de dependências muito rápidas ou muito lentas no tempo.

Aproximação súbita (ou repentina.)

Hamiltoniana muda muito rapidamente \Rightarrow $\left\{ \begin{array}{l} \text{O sistema não tem tempo} \\ \text{para “acompanhar” as mudanças.} \end{array} \right.$

Para melhor entender o significado de aproximação súbita, considere a equação de Schrödinger $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = H \mathcal{U}(t, t_0)$ para o operador de evolução temporal.

troque t por $\frac{sT}{2\pi}$, onde $\left\{ \begin{array}{l} s \text{ é um parâmetro adimensional} \\ T \text{ é uma escala de tempo, com } \Omega \equiv \frac{2\pi}{T} \end{array} \right.$

e obtenha: $i \frac{\partial}{\partial s} \mathcal{U}(t, t_0) = \frac{H}{2\pi\hbar/T} \mathcal{U}(t, t_0) = \frac{H}{\hbar\Omega} \mathcal{U}(t, t_0)$

Note que se $T \rightarrow 0 \Rightarrow \Omega \rightarrow \infty$ e temos $\frac{\partial}{\partial s} \mathcal{U}(t, t_0) \approx 0$ (\mathcal{U} constante no tempo).

Como $\mathcal{U}(t_0, t_0) = 1 \Rightarrow \lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{U}(t, t_0) = 1$ (para t imediatamente após T).

De fato, basta pedir que T seja pequeno comparado com $\frac{2\pi}{\omega_{ab}}$, onde

$\hbar\omega_{ab} = E_a - E_b$, dois níveis de energia relevantes de H .

Hamiltonianas com dependência extrema no tempo

Aproximação adiabática

Tendemos a aceitar a aproximação adiabática sem pensar muito. Dada uma Hamiltoniana que depende de alguns parâmetros, simplesmente calculamos os autovalores em função destes parâmetros. Nesta aproximação, se os parâmetros mudam “vagarosamente” com o tempo, então os autovalores são corrigidos apenas em função da mudança deste parâmetros. A chave da questão é: o que significa “vagarosamente”? A escala de tempo de mudança dos parâmetros precisa ser muito maior que a escala típica de tempo do sistema $2\pi/\omega_{ab}$. Ex: curva de potencial da molécula de hidrogênio, onde para cada valor de R , distância entre os núcleos, resolvemos a parte eletrônica do problema. Vale porque o “movimento” nuclear é de fato muito mais lento que o “movimento” eletrônico. Em seguida, monta-se a curva de potencial $E_0(R)$ e calcula-se o espectro vibracional da molécula.

Para entender melhor isso, considere: $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ que pode ser entendida por $H(t)|n; t\rangle = E_n(t)|n; t\rangle$ simplesmente notando que **a cada instante H muda, assim como seus autokets e seus autovalores.** A evolução

temporal é comandada por $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha; t\rangle = H(t)|\alpha; t\rangle$

Aproximação Adiabática



Base completa a cada instante

Consideraremos soluções do tipo $\begin{cases} |\alpha; t\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n; t\rangle \\ c_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' \end{cases}$ e substituindo

em $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha; t\rangle = H(t) |\alpha; t\rangle$, com o uso de $H(t) |n; t\rangle = E_n(t) |n; t\rangle$, obtemos:

$$\sum_n e^{i\theta_n(t)} \left(\dot{c}_n(t) |n; t\rangle + c_n(t) \frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle \right) = 0$$

Ao multiplicarmos a equação acima por $\langle m; t|$, temos:



Até aqui, sem aproximações

$$\dot{c}_m(t) = - \sum_n c_n(t) e^{i[\theta_n(t) - \theta_m(t)]} \underbrace{\langle m, t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle \right)}_{\text{aqui reside a novidade}}$$

onde usamos que $\langle m; t | n; t\rangle = \delta_{mn}$ se ambos em t .

Se derivarmos a equação da caixa verde em relação à t e a multiplicarmos por $\langle m; t|$ com $m \neq n$, obtemos:

$$\langle m; t | \dot{H} | n; t\rangle = [E_n(t) - E_m(t)] \langle m; t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle \right)$$

Assim, finalmente podemos escrever:

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t) \langle m, t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |m; t\rangle \right) - \sum_{n \neq m} c_n(t) e^{i[\theta_n(t) - \theta_m(t)]} \frac{\langle m, t | \dot{H} | n; t\rangle}{E_n - E_m}$$

Aproximação Adiabática

A equação:
$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t) \langle m; t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |m; t\rangle \right) - \sum_{n \neq m} c_n(t) e^{i[\theta_n(t) - \theta_m(t)]} \frac{\langle m; t | \dot{H} | n; t \rangle}{E_n - E_m}$$

é a solução formal do problema dependente do tempo. Note que com a evolução temporal, aparece o acoplamento entre c_m e os c_n 's (o estado $|m; t\rangle$ começa a misturar com o $|n; t\rangle, n \neq m$) devido ao termo \dot{H} .

A aproximação adiabática, consiste em assumir que

Argumento (do livro texto) está errado!

$$\left| \frac{\langle m; t | \dot{H} | n; t \rangle}{E_n - E_m} \right| = \frac{1}{\tau} \ll \left| \langle m; t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |m; t\rangle \right) \right| \sim \left| \frac{E_m}{\hbar} \right|$$

Ou seja, a escala de tempo τ para mudanças na Hamiltoniana precisa ser muito grande comparada com o inverso da frequência natural do sistema. Isto resulta

em:
$$\begin{cases} c_m(t) = e^{i\gamma_n(t)} c_m(0) \\ \gamma_m(t) \equiv i \int_0^t \langle m; t' | \left(\frac{\partial}{\partial t'} |m; t'\rangle \right) dt' \end{cases}$$

Note que $0 = \frac{\partial}{\partial t} \langle m; t | m; t \rangle = \langle m; t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |m; t\rangle \right) + \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle m; t | \right) |m; t\rangle$

ou seja, $\langle m; t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |m; t\rangle \right) = - \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle m; t | \right) |m; t\rangle = - \left(\langle m; t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |m; t\rangle \right) \right)^*$

onde se conclui que $\langle m; t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |m; t\rangle \right) \Rightarrow$ imaginário puro.

Aproximação Adiabática

A equação:
$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t) \langle m; t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |m; t\rangle \right) - \sum_{n \neq m} c_n(t) e^{i[\theta_n(t) - \theta_m(t)]} \frac{\langle m; t | \dot{H} | n; t \rangle}{E_n - E_m}$$

é a solução formal do problema dependente do tempo. Note que com a evolução temporal, aparece o acoplamento entre c_m e os c_n 's (o estado $|m; t\rangle$ começa a misturar com o $|n; t\rangle, n \neq m$) devido ao termo \dot{H} .

A aproximação adiabática, consiste em assumir que

Argumento correto

$$\left| \frac{\langle m; t | \dot{H} | n; t \rangle}{E_n - E_m} \right| = \frac{1}{\tau} \ll \left| \langle m; t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |m; t\rangle \right) \right| = \left| \langle m; t | \left(\frac{|m; t + \Delta t\rangle - |m; t\rangle}{\Delta t} \right) \right|$$

Ou seja, a escala de tempo τ de transições entre estados precisa ser muito grande comparada com as mudanças no estado original $|m; t\rangle$ devido à $H(t)$.

Isto resulta em:
$$\begin{cases} c_m(t) = e^{i\gamma_m(t)} c_m(0) \\ \gamma_m(t) \equiv i \int_0^t \langle m; t' | \left(\frac{\partial}{\partial t'} |m; t'\rangle \right) dt' \end{cases}$$

Note que $0 = \frac{\partial}{\partial t} \langle m; t | m; t \rangle = \langle m; t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |m; t\rangle \right) + \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle m; t | \right) |m; t\rangle$

ou seja, $\langle m; t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |m; t\rangle \right) = - \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle m; t | \right) |m; t\rangle = - \left(\langle m; t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |m; t\rangle \right) \right)^*$

onde se conclui que $\langle m; t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |m; t\rangle \right) \Rightarrow$ imaginário puro.

Aproximação Adiabática

Assim, concluímos que na aproximação adiabática, se o sistema começa em um autoestado $|n\rangle$ de $H(0)$, então ele permanece no autoestado $|n;t\rangle$ de $H(t)$, pois $c_i(0) = 0$ a menos que $i = n$, e neste caso $c_n(0) = 1$. Nestas condições e das

$$\text{equações} \begin{cases} |\alpha;t\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n;t\rangle \\ c_n(t) = e^{i\gamma_n(t)} c_n(0) \end{cases} \implies |\alpha^{(n)};t\rangle = e^{i\gamma_n(t)} e^{i\theta_n(t)} |n;t\rangle$$

Vejamos se está consistente. Sabemos que quando H não depende do tempo,

$|n;t\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$. Com isso podemos calcular $\langle n,t | (\frac{\partial}{\partial t} |n;t\rangle) = -i \frac{E_n}{\hbar}$ e da

equação $\gamma_n(t) \equiv i \int_0^t \langle n,t' | (\frac{\partial}{\partial t'} |n;t'\rangle) dt'$, temos $\gamma_n(t) = + \frac{E_n t}{\hbar}$. Por outro

lado, a partir de $\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'$, temos que $\theta_n(t) = -\frac{E_n t}{\hbar}$. Assim, as

duas exponenciais de $|\alpha^{(n)};t\rangle$ se cancelam, e obtemos $|\alpha^{(n)};t\rangle = |n;t\rangle$, conforme esperado. **Esta verificação de consistência (do livro texto) está errada!**

- *A aproximação adiabática é aplicada com grande sucesso em cálculo de estruturas eletrônicas, vibracionais e rotacionais de moléculas e sólidos.*
- *A interpretação do significado da fase $\gamma_n(t)$ é nada óbvia. Recentemente, foi mostrado que $\gamma_n(t)$ é mensurável para Hamiltoniana's cíclicas!*

Aproximação Adiabática

Assim, concluímos que na aproximação adiabática, se o sistema começa em um autoestado $|n\rangle$ de $H(0)$, então ele permanece no autoestado $|n;t\rangle$ de $H(t)$, pois $c_i(0) = 0$ a menos que $i = n$, e neste caso $c_n(0) = 1$. Nestas condições e das

$$\text{equações} \begin{cases} |\alpha;t\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n;t\rangle \\ c_n(t) = e^{i\gamma_n(t)} c_n(0) \end{cases} \implies |\alpha^{(n)};t\rangle = e^{i\gamma_n(t)} e^{i\theta_n(t)} |n;t\rangle$$

Este é o teste de consistência correto.

Vejam se está consistente. Sabemos que quando H não depende do tempo, $|n;t\rangle = |n\rangle$. Com isso podemos calcular $\langle n,t | (\frac{\partial}{\partial t} |n;t\rangle) = 0$ (pois $|n;t\rangle$ não muda com o tempo). Isso faz $\gamma_n(t) \equiv i \int_0^t \langle n,t' | (\frac{\partial}{\partial t'} |n;t'\rangle) dt' = 0$. Por outro lado, a partir de $\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'$, temos que $\theta_n(t) = -\frac{E_n t}{\hbar}$. Assim, a fase final, contém apenas a componente da evolução do estado estacionário, ou seja $|\alpha^{(n)};t\rangle = e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n;t=0\rangle = e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle$, conforme esperado.

- *A aproximação adiabática é aplicada com grande sucesso em cálculo de estruturas eletrônicas, vibracionais e rotacionais de moléculas e sólidos.*
- *A interpretação do significado da fase $\gamma_n(t)$ é nada óbvia. Recentemente, foi mostrado que $\gamma_n(t)$ é mensurável para Hamiltoniana's cíclicas!*

Fase de Berry

Quantal phase factors accompanying adiabatic changes, by M.V. Berry
Proceedings of the Royal Society of London, Series A **392** (1984) 45

Considere que a dependência da Hamiltoniana possa ser representada por um “vetor” de parâmetros $\mathbf{R}(t)$. Ou seja, que exista algum espaço, no qual as componentes de $\mathbf{R}(t)$ especificam a Hamiltoniana e sua forma de evolução temporal. Um exemplo disso seria um campo magnético aplicado ao sistema e você girando o botão de intensidade e/ou orientação do campo. Desta forma,

$$\text{temos } \begin{cases} E_n(t) = E_n(\mathbf{R}(t)) \\ |n; t\rangle = |n(\mathbf{R}(t))\rangle \end{cases} \implies \langle n; t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle \right) = \langle n; t | \left(\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle \right) \cdot \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial t}$$

onde $\nabla_{\mathbf{R}}$ é simplesmente o operador gradiente no espaço e direção de \mathbf{R} . A

fase geométrica $\gamma_n(T) \equiv i \int_0^T \langle n, t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle \right) dt$, fica:

$$\gamma_n(T) = i \int_0^T \langle n; t | \left(\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle \right) \cdot \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial t} dt = i \int_{\mathbf{R}(0)}^{\mathbf{R}(T)} \langle n; t | \left(\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle \right) \cdot d\mathbf{R}.$$

No caso em que T representa um período de um ciclo $\mathbf{R}(T) = \mathbf{R}(0)$ sobre a

curva $C \Rightarrow$
$$\gamma_n(C) = i \oint \langle n; t | \left(\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle \right) \cdot d\mathbf{R}$$

Fase de Berry ou fase geométrica

Para usar uma matemática conhecida em $\gamma_n(C) = i \oint \langle n; t | \left(\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle \right) \cdot d\mathbf{R}$,

$$\text{defina } \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \equiv i \langle n; t | \left(\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle \right) \implies \gamma_n(C) = \begin{cases} \oint \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} \\ \Downarrow \text{ teorema de Stokes} \\ \int (\nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R})) \cdot d\mathbf{a} \end{cases}$$

onde a integração em $d\mathbf{a}$ é sobre uma área circundada pelo caminho C . Assim, a fase de Berry é determinada pelo “fluxo” de um campo generalizado $\mathbf{B}_n \equiv \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R})$ através da superfície \mathbf{S} , delimitada pelo circuito seguido por $\mathbf{R}(t)$ em um ciclo.

- *Note que independente de \mathbf{R} , $\gamma_n(C)$ terá o mesmo valor, se o fluxo sobre a superfície for o mesmo.*
- *Note que $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$ e $\mathbf{B}_n(\mathbf{R})$ são reais.*

Vamos agora explorar nossa escolha de formulação matemática do problema.

Suponha que multipliquemos o ket $|n; t\rangle$ por uma fase arbitrária, $e^{i\delta(\mathbf{R})}$, dependente de $\mathbf{R}(t)$. Isto é $|n; t\rangle \Rightarrow e^{i\delta(\mathbf{R})} |n; t\rangle$. Da definição acima de $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$ temos $\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \Rightarrow \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \nabla_{\mathbf{R}}\delta(\mathbf{R})$, o que não altera $\gamma_n(C)$ pois, $\nabla \times \nabla\delta = 0$. *Aparentemente, $\gamma_n(C)$ não depende de detalhes de \mathbf{R} . Falta mostrar que não é zero sempre. Note que o presente formalismo tem similaridade com o de transformação de Gauge.*

Fase de Berry ou fase geométrica

Agora vamos calcular $\gamma_n(C)$.

$$\text{De } \begin{cases} \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \equiv i \langle n; t | (\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle) \\ \mathbf{B}_n \equiv \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \end{cases} \Rightarrow \mathbf{B}_n = i \nabla_{\mathbf{R}} \times \left(\langle n; t | (\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle) \right)$$

Para desenvolver isso, lembre que $\nabla_{\mathbf{R}} \times (f \nabla_{\mathbf{R}}) = \nabla_{\mathbf{R}} f \times \nabla_{\mathbf{R}} + f \underbrace{\nabla_{\mathbf{R}} \times \nabla_{\mathbf{R}}}_0$

e escreva $\mathbf{B}_n = i \left(\nabla_{\mathbf{R}} \langle n; t | \right) \times \left(\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle \right)$. Com auxílio do operador unidade podemos escrever $\mathbf{B}_n = i \sum_{m \neq n} \left(\nabla_{\mathbf{R}} \langle n; t | \right) |m; t\rangle \times \langle m; t | \left(\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle \right)$ com

duas sutilezas $\left\{ \begin{array}{l} (1) \text{ inserção da unidade colocando o } |m; t\rangle \text{ à esquerda e } \langle m; t | \text{ à} \\ \text{direita do } \times \\ (2) \text{ que a soma não precisa ter } n, \text{ pois este contribui com zero} \end{array} \right.$

Para conseguir uma nova expressão para o termo $\langle m; t | \left(\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle \right)$, tome o $\nabla_{\mathbf{R}}$ da eq. de Schrödinger e a multiplique por $\langle m; t |$, isto é, calcule

$$\langle m; t | \nabla_{\mathbf{R}} \left(H(\mathbf{R}) |n; t\rangle = E_n(\mathbf{R}) |n; t\rangle \right) \quad \text{com } m \neq n.$$

Fase de Berry ou fase geométrica

Do slide anterior, temos :

$$\left(\langle m; t | \nabla_{\mathbf{R}} \left(H(\mathbf{R}) |n; t\rangle = E_n(\mathbf{R}) |n; t\rangle \right) \right) \quad \text{com } m \neq n.$$

$$\langle m; t | \left((\nabla_{\mathbf{R}} H) |n; t\rangle + H(\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle) = (\nabla_{\mathbf{R}} E_n) |n; t\rangle + E_n(\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle) \right)$$

$$\langle m; t | (\nabla_{\mathbf{R}} H) |n; t\rangle + E_m \langle m; t | (\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle) = E_n \langle m; t | (\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle)$$

para finalmente obter $\langle m; t | (\nabla_{\mathbf{R}} |n; t\rangle) = \frac{\langle m; t | (\nabla_{\mathbf{R}} H) |n; t\rangle}{E_n - E_m}$

onde usamos que $\langle m; t | (\nabla_{\mathbf{R}} E_n) |n; t\rangle = (\nabla_{\mathbf{R}} E_n) \langle m; t | n; t\rangle = 0$

Isto permite escrever uma expressão para fase de Berry (ou fase geométrica):

$$\gamma_n(C) = \int \mathbf{B}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{a}$$

$$\mathbf{B}_n(\mathbf{R}) = i \sum_{m \neq n} \frac{\langle n; t | (\nabla_{\mathbf{R}} H) |m; t\rangle \times \langle m; t | (\nabla_{\mathbf{R}} H) |n; t\rangle}{(E_n - E_m)^2}.$$

Esta fórmula já foi testada experimentalmente para situações onde $\gamma_n(C) \neq 0$.

Fase de Berry para spin 1/2

Vamos calcular $\gamma_n(C)$ para um exemplo específico: uma partícula de spin 1/2 manipulada por um campo magnético que muda vagarosamente no tempo. Para evitar confusão de notação, chamaremos este campo magnético de $\mathbf{R}(t)$. A

Hamiltoniana do sistema é dada por $H(t) = H(\mathbf{R}(t)) = -\frac{2\mu}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{R}(t)$ onde \mathbf{S} é o operador momento angular de spin 1/2. Escrito desta forma, o momento magnético de spin para cima é simplesmente μ . Fixando \mathbf{R} na direção $\hat{\mathbf{z}}$,

$$\text{temos de: } H(\mathbf{R})|n; t\rangle = E_n(\mathbf{R})|n; t\rangle \Rightarrow \begin{cases} E_{\pm}(t) = \mp\mu R(t) \text{ (autovalores)} \\ |\pm; t\rangle \text{ (autokets)} \end{cases}$$

onde $R(t)$ é magnitude do campo magnético e os sinais \pm refletem spin para cima e spin para baixo, em relação ao sentido do campo magnético $\mathbf{R}(t)$. Para

calcular $\mathbf{B}_n(\mathbf{R})$ de $\mathbf{B}_n(\mathbf{R}) = i \sum_{m \neq n} \frac{\langle n; t | (\nabla_{\mathbf{R}} H) | m; t \rangle \times \langle m; t | (\nabla_{\mathbf{R}} H) | n; t \rangle}{(E_n - E_m)^2}$, é

necessário calcular

$$\begin{cases} \bullet (E_{\pm} - E_{\mp})^2 \rightarrow \mu^2 R^2 \\ \bullet \nabla_{\mathbf{R}} H \rightarrow -\frac{2\mu}{\hbar} \mathbf{S} \\ \bullet \langle \pm; t | \mathbf{S} | \mp; t \rangle \times \langle \mp; t | \mathbf{S} | \pm; t \rangle \rightarrow \begin{cases} \text{Para a escolha da} \\ \text{base use } \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{z}} \end{cases} \end{cases}$$

Fase de Berry para spin 1/2

Assim, tomando $\begin{cases} \mathbf{S} = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)\hat{\mathbf{x}} + \frac{1}{2i}(S_+ - S_-)\hat{\mathbf{y}} + S_z\hat{\mathbf{z}} \\ S_z|\pm; t\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm; t\rangle \end{cases}$ ($\hat{\mathbf{z}}$ grudado no $\mathbf{R}(t)$) podemos

calcular $\langle \pm; t | \mathbf{S} | \mp; t \rangle = \frac{\hbar}{2}(\hat{\mathbf{x}} \mp i\hat{\mathbf{y}})$. Juntando tudo, temos $\mathbf{B}_{\pm}(\mathbf{R}) = \mp \frac{1}{2R^2(t)}\hat{\mathbf{z}}$

Se tivéssemos feito a conta com $|\pm; t\rangle$ autokets $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{R}}$ e não de $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{z}}$, obteríamos

$$\mathbf{B}_{\pm}(\mathbf{R}) = \mp \frac{1}{2R^2(t)}\hat{\mathbf{R}}$$

Isso permite calcular a fase de Berry, por $\gamma_{\pm}(C) = \mp \frac{1}{2} \int \frac{\hat{\mathbf{R}} \cdot d\mathbf{a}}{R^2} = \mp \frac{1}{2}\Omega$

onde Ω é o ângulo sólido subentendido pelo caminho que o vetor $\mathbf{R}(t)$ viaja, relativo à origem $\mathbf{R} = 0$.

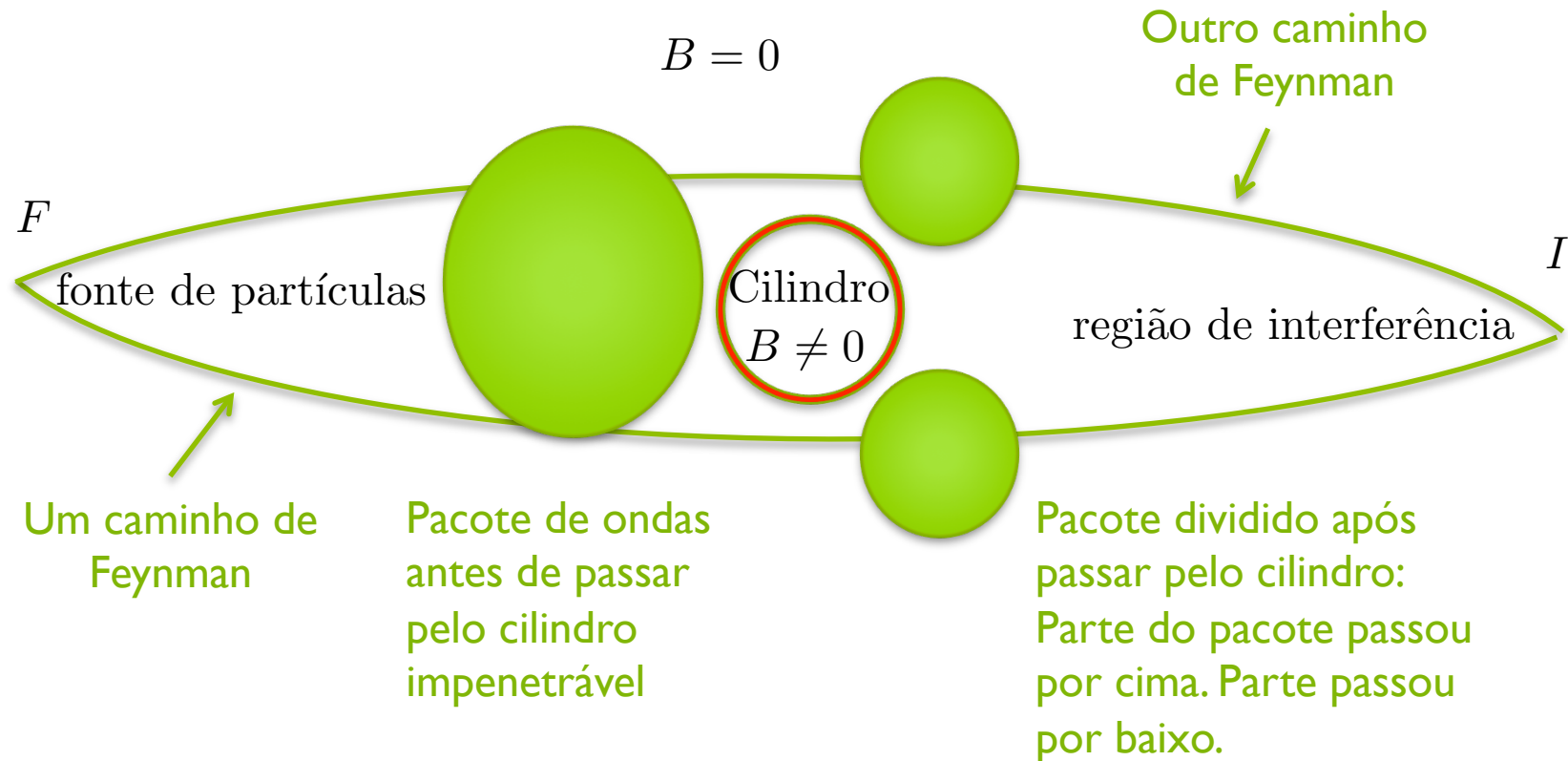
Medidas experimentais feitas com neutrons ultra-frios confirmam experimentalmente a fase geométrica da fórmula acima.

Ver detalhes, em D. J. Richardson et al., *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 2030.

“Revisitando Aharonov-Bohm e monopolos magnéticos” fica para para casa.

A leitura é meio indigesta e, portanto, me procurem para dúvidas.

Revisitando o efeito Aharonov-Bohm



Em FI001, estudamos como a probabilidade de encontrar a partícula na região de interferência I depende do fluxo magnético. O estudo foi feito com integrais de Feynman. A partícula não pode penetrar no cilindro, onde $\mathbf{B} \neq 0$ ($\mathbf{B} = 0$ fora do cilindro) mas ela percebe o potencial vetor que difere de zero fora do cilindro. A interferência resultante dependia do fluxo do campo magnético dentro do cilindro.

Revisitando o efeito Aharonov-Bohm

Dica sobre a equação 5.6.43, $\langle \mathbf{r} | n(\mathbf{R}) \rangle = \exp \left(\frac{ie}{\hbar c} \int_{\mathbf{R}}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' \right) \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$

A solução do problema de uma partícula na caixa pode ser obtida de

$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \psi = E \psi$, com condições periódicas de contorno. Uma forma mais

simples é resolver a equação $\mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \mathbf{p}' | \mathbf{p}' \rangle$ na representação das coordenadas.

Lembre que $[\mathbf{p}, \frac{\mathbf{p}^2}{2m}] = 0$ e os autokets de \mathbf{p} também são autokets de $\frac{\mathbf{p}^2}{2m}$.

Assim, $\langle \mathbf{r}' | \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \mathbf{p}' \langle \mathbf{r}' | \mathbf{p}' \rangle \Rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla \psi_n(\mathbf{r}') = \mathbf{p}'_{(n)} \psi_n(\mathbf{r}')$. O que muda se a caixa

estivesse sujeita à um campo magnético? Troque \mathbf{p} por $\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$ para obter:

$\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \psi_n^B(\mathbf{r}') = \mathbf{p}'_{(n)} \psi_n^B(\mathbf{r}')$ cujo espectro é o mesmo $\mathbf{p}'_n^B = \mathbf{p}'_{(n)}$ com

$\psi_n^B(\mathbf{r}') = \exp \left(\frac{ie}{\hbar c} \int^{\mathbf{r}'} \mathbf{A}(\mathbf{r}'') \cdot d\mathbf{r}'' \right) \psi_n(\mathbf{r}')$ (verifique, inserindo-a na equação

diferencial acima). Para escrever a solução com respeito à uma nova origem \mathbf{R} ,

faça simplesmente a troca : $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r} - \mathbf{R}$, e obtenha

$$\psi_n^B(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \exp \left(\frac{ie}{\hbar c} \int_{\mathbf{R}}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' \right) \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})$$