

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

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 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha;t\rangle = H(t)|\alpha;t\rangle$. Se estivermos buscando uma solução estacionária, como entender t de $H(t)$? [lousa](#)

Aproximação Adiabática



Base completa a cada instante

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

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

lousa

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

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

Até aqui, sem aproximações

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:

(se $m=n$ a derivada de E_n com respeito a t sobreviveria)

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

Assim, finalmente podemos escrever:

nenhuma aproximação até agora

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

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

o argumento do texto (impreciso) reside no último termo

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

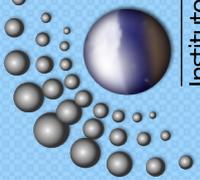
Ou seja, a escala de tempo τ para mudanças na Hamiltoniana precisa ser muito grande comparada com o inverso da frequência natural do ^{estado do} sistema. Isto resulta

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

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 e $\gamma_m(t)$ é uma fase.



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 mais adequado

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

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 dá:
$$\begin{cases} c_m(t) = e^{i\gamma_m(t)} c_m(0) \\ \gamma_m(t) \equiv i \int_0^t \langle m; t' | \left(\frac{\partial}{\partial t'} |m; t' \rangle \right) dt' \end{cases} \Rightarrow \text{Substitua em } \dot{c}_m(t) = -c_m(t) \langle m; t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |m; t \rangle \right)$$

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,

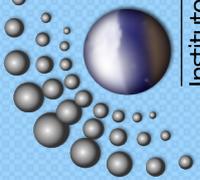
$|n;t\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$. Com isso podemos calcular $\langle n,t | \left(\frac{\partial}{\partial t} |n;t\rangle \right) = -i \frac{E_n}{\hbar}$ e da

equação $\gamma_n(t) \equiv i \int_0^t \langle n,t' | \left(\frac{\partial}{\partial t'} |n;t'\rangle \right) dt'$, 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

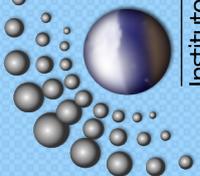
duas exponenciais de $|\alpha^{(n)};t\rangle$ se cancelam, e obtemos $|\alpha^{(n)};t\rangle = |n;t\rangle$, conforme esperado.

- *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!*



- (1) Primeiro note que se $H(t)$ não depende do tempo $\frac{\partial}{\partial t}|m; t\rangle = \frac{-iE_m}{\hbar}|m; t\rangle$ e a equação definida na caixa azul do slide 5 fornece $\dot{c}_m(t) = \frac{+iE_m}{\hbar}c_m(t)$ (usei também que $\dot{H}(t) = 0$) e $\therefore c_m(t) = e^{+iE_m t/\hbar}c_m(0)$, conforme vimos.
- (2) Solução não trivial da equação da caixa azul só existe quando $H(t)$ depende do tempo. A questão é em que circunstância podemos jogar fora o segundo termo (o que acopla $n \neq m$)?
- (3) Note que os dois termos da caixa azul do slide 5 têm origem na quantidade $\langle m, t | \frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle$, conforme pode ser visto na caixa laranja do slide 3. É preciso entender melhor o que significa esta quantidade.

- (4) Comece escrevendo $\frac{\partial}{\partial t}|n; t\rangle = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{|n; t + \Delta t\rangle - |n; t\rangle}{\Delta t}$ e defina $|n; t + \Delta t\rangle = \sum_{m'} a_{m'}(n; t + \Delta t)|m'; t\rangle$ com $a_{m'}(n; t) = \delta_{m'n}$. Note que $|a_{m'}(n; t + \Delta t)|^2$ é a probabilidade de encontrar o sistema em $|m'; t\rangle$ no instante $t + \Delta t$ sabendo que ele estava em $|n; t\rangle$ no instante t . $a_{m'}(n; t + \Delta t)$ é a amplitude desta probabilidade. Use a expressão para $|n; t + \Delta t\rangle$ para re-escrever a derivada da caixa verde.



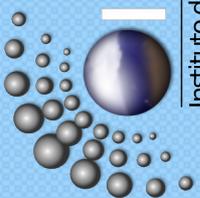
$$(5) \frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle = \sum_{m'} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{a_{m'}(n; t + \Delta t) - a_{m'}(n; t)}{\Delta t} |m'; t\rangle = \sum_{m'} \dot{a}_{m'}(n; t) |m'; t\rangle$$

onde $\dot{a}_m(n; t) = \langle m; t | \frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle$ pode ser interpretado como a taxa de variação da amplitude de probabilidade de transição de n para m no instante t , devido exclusivamente a dependência temporal da Hamiltoniana (note que $\dot{a}_m(n; t) = 0$ se H for independente do tempo). Essas taxas informam como a base de kets evolui para continuarem sendo autokets de $H(t)$.

(6) É importante notar que como $\langle m; t | \frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle = -\langle n; t | \frac{\partial}{\partial t} |m; t\rangle^*$, temos que $\dot{a}_m(n; t) = -\dot{a}_n^*(m; t)$, ou seja, em módulo, ir de n para m é o mesmo que ir de m para n . Note aparente inversão na equação da caixa laranja do slide 3.

(7) A aproximação adiabática funciona se $|\dot{a}_n(n; t)| \gg |\dot{a}_m(n; t)|$ para $m \neq n$.

(8) Note que para $m \neq n \Rightarrow |\dot{a}_m(n; t)| = \left| \frac{\langle m, t | \dot{H} | n; t \rangle}{E_n - E_m} \right|$ que pode ser pequeno, se $[H(t), \dot{H}(t)] \approx 0$ ou se $|E_n - E_m| \gg 0$. Nos dois casos as transições $n \rightarrow m$ podem ficar irrelevantes e o processo pode ser dominado por um $|\dot{a}_n(n; t)| \neq 0$.



(9) Quando isso é válido para qualquer que seja t , temos para (Δt pequeno):

$$|n; t + \Delta t\rangle = |n; t\rangle + \frac{\partial}{\partial t}|n; t\rangle \Delta t = |n; t\rangle + \Delta t \sum_{m'} \dot{a}_{m'}(n; t) |m'; t\rangle$$

que fica dominado por $(1 + \dot{a}_n(n; t)\Delta t)|n; t\rangle \propto |n; t\rangle$. Se aplicássemos isso de Δt em Δt , concluiríamos que o sistema permaneceria no estado antigo $|n; t\rangle$ o tempo todo. Na prática, a base de auto-estados muda para acompanhar $H(t)$, mas para um dado $|n; t + \Delta t\rangle$ sua maior componente é o $|n; t\rangle$.

(10) Se o sistema fica sempre no mesmo estado e se esse estado está normalizado, a mudança em $|\alpha^{(n)}; t\rangle$ com o passar do tempo, só pode ser uma fase. Esta fase depende do tempo e garante que $\dot{c}_n(t) \neq 0$ (solução não trivial).

(11) Finalmente, vamos testar a solução não trivial (dentro da aproximação adiabática) dada pela equação 5.6.16, isto é: $|\alpha^{(n)}; t\rangle = e^{i\gamma_n(t)} e^{i\theta_n(t)} |n; t\rangle$.

$|\alpha^{(n)}; t\rangle$ precisa ser solução de $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha^{(n)}; t\rangle = H(t) |\alpha^{(n)}; t\rangle$. Substituição

$$\text{direta dá: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha^{(n)}; t\rangle = i\hbar e^{i\gamma_n(t)} e^{i\theta_n(t)} \left(i \frac{\partial \gamma_n(t)}{\partial t} + i \frac{\partial \theta_n(t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \right) |n; t\rangle =$$

$$= i\hbar e^{i\gamma_n(t)} e^{i\theta_n(t)} \left(i \frac{\partial (i \int_0^t \langle n; t' | (\frac{\partial}{\partial t'} |n; t'\rangle) dt')}{\partial t} + i \frac{\partial (-\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt')}{\partial t} + \dot{a}_n(t) \right) |n; t\rangle$$

$$= i\hbar \left(-\langle n; t | \frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle - i \frac{E_n(t)}{\hbar} + \langle n; t | \frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle \right) |\alpha^{(n)}; t\rangle = E_n(t) |\alpha^{(n)}; t\rangle$$

Ver itens 5 e 9

(12) O que acontece quando temos uma Hamiltoniana periódica em τ , isto é $H(t + \tau) = H(t)$?

(13) **A Fotografia:** Lembrando que $\dot{a}_m(n; t) = \langle m; t | \frac{\partial}{\partial t} | n; t \rangle$, e por ser

esperado que
$$\begin{cases} |n; t + \tau\rangle = e^{if} |n; t\rangle \\ \frac{\partial}{\partial t} |n; t + \tau\rangle = e^{if} \frac{\partial}{\partial t} |n; t\rangle \end{cases} \Rightarrow \therefore \dot{a}_m(n; t + \tau) = \dot{a}_m(n; t)$$

(14) **O Filme:** Não é óbvio, entretanto, que $\gamma_n(t + \tau) = \gamma_n(t)$, onde

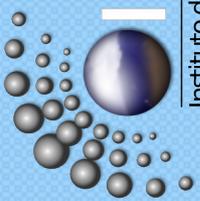
$$\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle n; t' | \left(\frac{\partial}{\partial t'} | n; t' \rangle \right) dt' \quad (\text{carrega o histórico de } \dot{a}_m(n; t)), \text{ pois para}$$

isso teríamos que ter
$$\int_t^{t+\tau} \langle n; t' | \frac{\partial}{\partial t'} | n; t' \rangle dt' = \int_t^{t+\tau} \dot{a}_m(n; t') dt' = 0$$

(15) A solução mais geral seria
$$\int_t^{t+\tau} \langle n; t' | \frac{\partial}{\partial t'} | n; t' \rangle dt' = \gamma_n(t + \tau) - \gamma_n(t) = cte,$$

pois isso é suficiente para satisfazer a condição (13), $\frac{\partial}{\partial t} \gamma_n(t + \tau) = \frac{\partial}{\partial t} \gamma_n(t)$

(16) Essa constante (*cte*), quando diferente de zero, ficou conhecida como fase de Berry ou fase geométrica (nome que justificaremos a seguir).



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

Fase de Berry ou fase geométrica

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

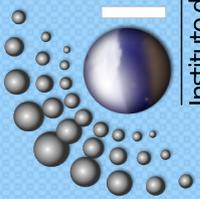
$$\text{defina } \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \equiv i \langle n; t | \left(\nabla_{\mathbf{R}} |n; t \rangle \right) \implies \gamma_n(C) = \begin{cases} \oint \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} \\ \Downarrow \text{teorema de Stokes} \\ \int (\nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}))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

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

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

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

Aula 07 Do slide anterior, temos :

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

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

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

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

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

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

Fase de Berry para spin 1/2

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

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

Se tivéssemos feito a conta com $|\pm; t\rangle$ autokets $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{R}}$ e não de $\mathbf{S} \cdot \hat{z}$, 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 faça na próxima aula. Monopolos magnéticos, fica para para casa. A leitura é meio indigesta.

(1) 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.

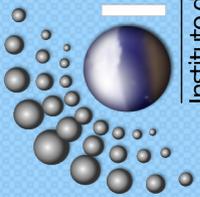
(2) Comece escrevendo $\nabla_{\mathbf{R}} |n; t \rangle = \hat{\mathbf{i}} \frac{\partial}{\partial X} |n; \mathbf{R}(t) \rangle + \hat{\mathbf{j}} \frac{\partial}{\partial Y} |n; \mathbf{R}(t) \rangle + \hat{\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial Z} |n; \mathbf{R}(t) \rangle$

onde, por exemplo, $\frac{\partial}{\partial X} |n; \mathbf{R}(t) \rangle = \lim_{\Delta X \rightarrow 0} \frac{|n; \mathbf{R}(t) + \hat{\mathbf{i}}\Delta X \rangle - |n; \mathbf{R}(t) \rangle}{\Delta X}$ e defina

$$|n; \mathbf{R}(t) + \hat{\mathbf{i}}\Delta X \rangle = \sum_{m'} a_{m'}(n; \mathbf{R}(t) + \hat{\mathbf{i}}\Delta X) |m'; \mathbf{R}(t) \rangle \text{ com } a_{m'}(n; \mathbf{R}(t)) = \delta_{m'n}.$$

Note que $|a_{m'}(n; \mathbf{R}(t) + \hat{\mathbf{i}}\Delta X)|^2$ é a probabilidade de encontrar o sistema em $|m'; \mathbf{R}(t) \rangle$ na configuração de campos $\mathbf{R}(t) + \hat{\mathbf{i}}\Delta X$ sabendo que ele estava em $|n; \mathbf{R}(t) \rangle$ na configuração de campos definida por $\mathbf{R}(t)$.

$a_{m'}(n; \mathbf{R}(t) + \hat{\mathbf{i}}\Delta X)$ é a amplitude desta probabilidade.



o Um voluntário para trazer tempos típicos de diversos sistemas: $T = \frac{2\pi}{\omega_{ab}}$,

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

- Sugestões:
- Poço unidimensional quadrado;
 - Oscilador Harmônico;
 - Spin (elétron e Ag) sob ação de campo magnético constante;
 - Excitação eletrônica do átomo de hidrogênio;
 - Molécula rodando;
 - Molécula vibrando;
 - Sólido vibrando.

Invente ou busque na literatura os parâmetros típicos de cada caso.

o Imagine que estamos resolvendo a Hamiltoniana de uma molécula:

$\hat{H}|i\rangle = \hat{E}_i|i\rangle$, onde \hat{H} contém energias cinéticas e potenciais de todas as

partículas envolvidas - elétrons e núcleos atômicos, onde os prótons são mais relevantes, uma vez que as moléculas são aglomerados de átomos que se

juntam devido suas interações elétricas. A dependência temporal surge quando simplificamos o problema, supondo que os núcleos se movem muito mais

lentamente que os elétrons. O t representa a Hamiltoniana $H(t)$

eletrônica mudando devido ao movimento nuclear.

Figure uploaded by [Soojong Pak](#)

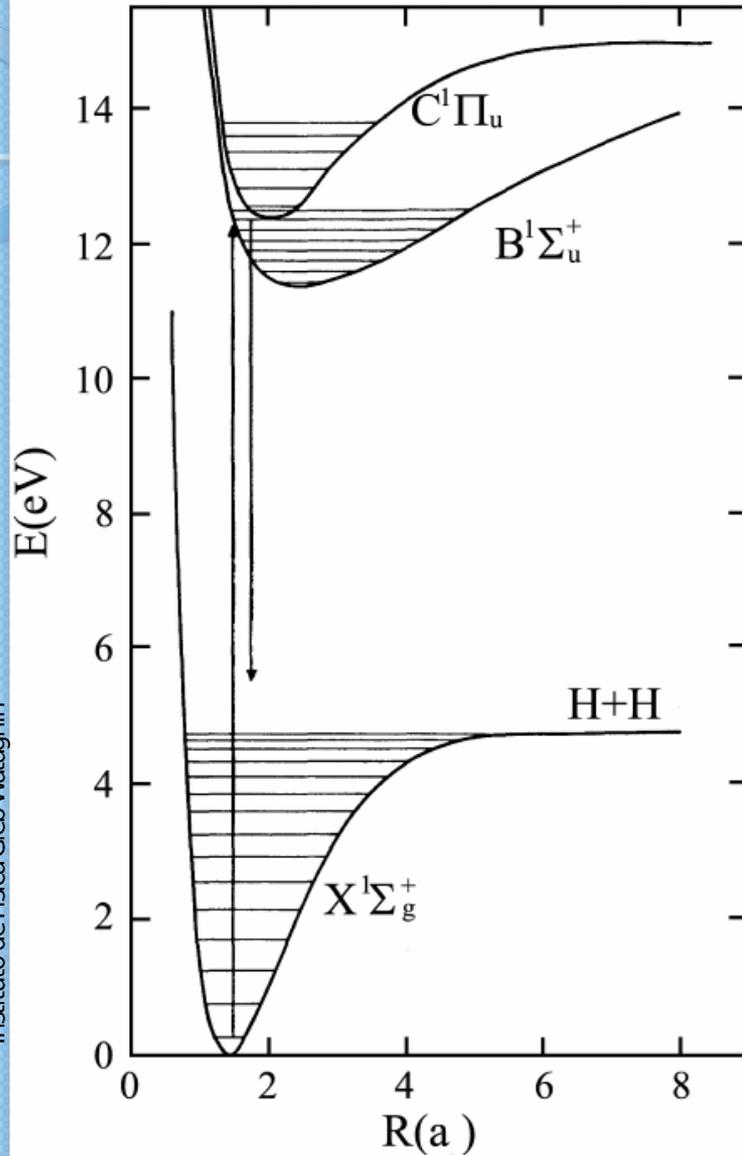
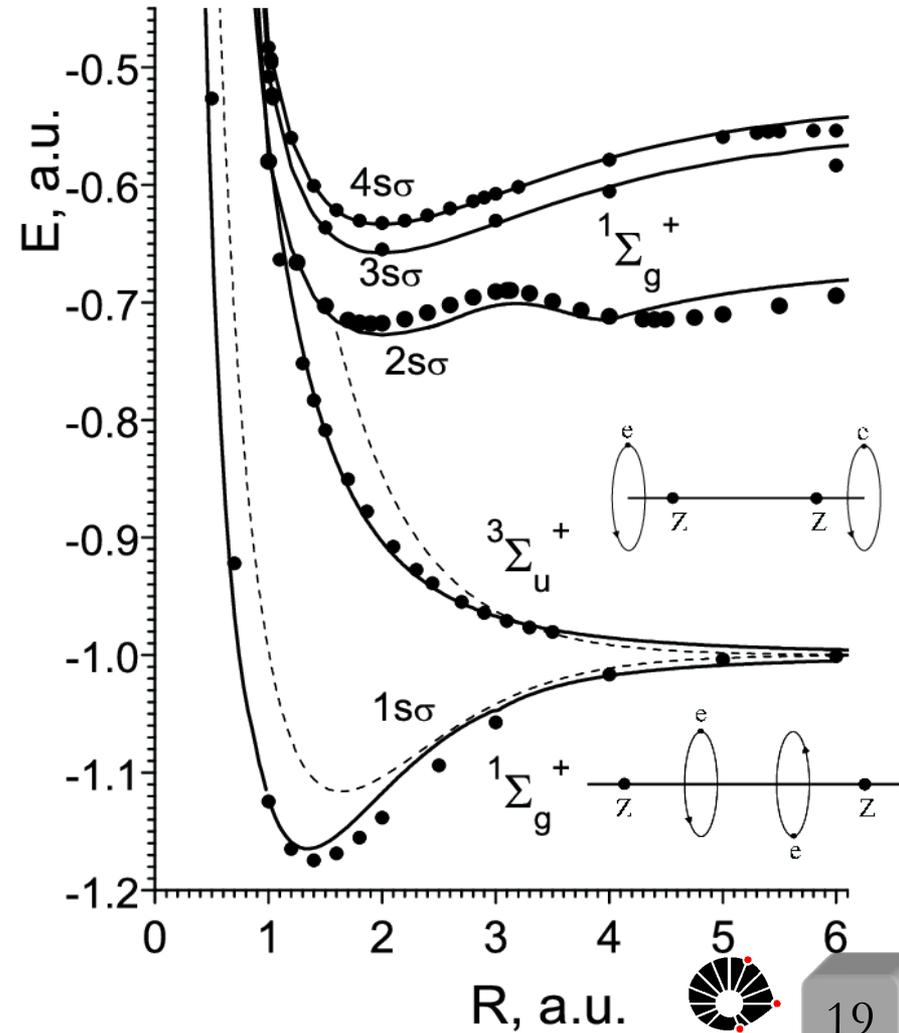


Figure uploaded by [Dudley R Herschbach](#)



Insira $\begin{cases} |\alpha; t\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n; t\rangle \\ c_n / \dot{\theta}_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' \end{cases}$ em $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha; t\rangle = H(t) |\alpha; t\rangle$, para obter

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n; t\rangle \right) = H(t) \left(\sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n; t\rangle \right). \text{ Derive por partes}$$

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

$$= \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} H(t) |n; t\rangle \text{ e faça uso de } \begin{cases} H(t) |n; t\rangle = E_n(t) |n; t\rangle, \\ e \\ \frac{\partial}{\partial t} e^{i\theta_n(t)} = \frac{-iE_n(t)}{\hbar} e^{i\theta_n(t)} \end{cases}$$

para obter:

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

$$= \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} E_n(t) |n; t\rangle \text{ e, simplificando:}$$

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

