

UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA  
BACHARELADO EM FÍSICA

**FASES TOPOLÓGICAS E GEOMÉTRICAS NA MECÂNICA  
QUÂNTICA**

JONAS BASTOS DE ARAÚJO

São Luís

2014

JONAS BASTOS DE ARAÚJO

**FASES TOPOLÓGICAS E GEOMÉTRICAS NA MECÂNICA  
QUÂNTICA**

Monografia apresentada ao Curso de Bacharelado  
em Física da Universidade Federal do Maranhão,  
para a obtenção do título de Bacharel em Física.

Orientador: Dr. Manoel Messias Ferreira Jr

São Luís

2014

Araújo, Jonas Bastos de.

Fases topológicas e geométricas na mecânica quântica/ Jonas Bastos de Araújo. – São Luís, 2014.

71 f.

Impresso por computador (fotocópia).

Orientador: Manoel Messias Ferreira Júnior.

Monografia (Graduação) – Universidade Federal do Maranhão, Curso de Física, 2014.

1. Mecânica quântica. 2. Fase de Berry. 3. Teorema adiabático. 4. Interferência quântica. I. Título.

CDU 530.145

JONAS BASTOS DE ARAÚJO

**FASES TOPOLÓGICAS E GEOMÉTRICAS NA MECÂNICA  
QUÂNTICA**

Monografia apresentada ao Curso de Bacharelado  
em Física da Universidade Federal do Maranhão,  
para a obtenção do título de Bacharel em Física.

Monografia aprovada em: \_\_\_\_ / \_\_\_\_ / \_\_\_\_\_

BANCA EXAMINADORA

---

Dr. Manoel Messias Ferreira Jr (Orientador)  
Universidade Federal do Maranhão

---

Dr. Rodolfo Alván Casana Sifuentes  
Universidade Federal do Maranhão

---

Dr. Edilberto Oliveira Silva  
Universidade Federal do Maranhão

---

Dr. Eduardo Moraes Diniz  
Universidade Federal do Maranhão

São Luís

2014

## AGRADECIMENTOS

Embora a graduação seja um passo muito pequeno, eu não poderia tê-lo dado sem a ajuda de inúmeras pessoas. A verdade é que se eu fosse escrever os nomes das pessoas a quem devo, precisaria usar mais de uma folha. Entretanto, algumas delas me vêm à cabeça imediatamente e sou forçado a mencioná-las.

Agradeço aos meus pais, pelo apoio *incondicional*, sem os quais seria impossível cursar Física.

Ao meu irmão, pela companhia e incontáveis caronas.

Ao Professor Manoel Messias e ao Professor Rodolfo Casana, a quem minha dívida transgride os limites dessa página.

Ao Professor Edilberto, pela ajuda frequente com respeito a referências úteis.

Ao Professor Eduardo, que talvez não saiba o quanto me ajudou.

Ao Professor Jerias, por realizar um trabalho de excelência na coordenação do curso de Física.

Ao Professor Marcos Araújo, pelo apoio veemente, bem como ao Professor Arlane, que me ensinou e motivou muito.

Ao Alex Lucena, por me tirar de um bom número de enrascadas e por estar sempre disposto a tirar dúvidas acerca do LaTeX.

À Letícia Lisboa, por sempre me lembrar de datas de provas e me ajudar com burocracias.

Ao Pedro Diego, Thyago Felix e Bruno Ribeiro, cada um à sua maneira, pela companhia e motivação calorosas.

À Thauany, Paula, Érika e à Crente, vulga Guida, pelo apoio perene.

## RESUMO

Neste trabalho são apresentadas duas aplicações da fase de Berry: o efeito Aharonov-Bohm e o caso da partícula com spin em uma região com campo magnético. Antes de se discutir o efeito Aharonov-Bohm, encontra-se a equação de Schrödinger para o potencial eletromagnético e se tece comentários acerca da invariância de gauge. Logo em seguida se aplica a equação de Schrödinger para evidenciar efeitos de interferência quântica e efeitos sobre as autoenergias de partículas carregadas sob a ação de potenciais vetor. A seguir se faz uma demonstração grosseira do teorema adiabático e uma prova mais formal da fase de Berry. Após isso, mostra-se que o efeito Aharonov-Bohm pode ser explicado em termos da fase de Berry. Evidencia-se, também, que há fase de Berry associada para uma partícula sob a ação de um campo magnético não constante no tempo.

Palavras-chave: fase de Berry, Aharonov-Bohm, teorema adiabático, spin, interferência quântica.

## ABSTRACT

This work involves two applications of Berry's phase: the Aharonov-Bohm effect and the case of a particle with spin in a region with a magnetic field. Before discussing the Aharonov-Bohm effect itself, the Schrödinger equation for the electromagnetic field is obtained and comments on gauge invariance are made. The Schrödinger equation is then applied to a particle in a region with a vector potential and quantum interference effects as well as effects on the eigenenergies are evidenced. Following that, a rough demonstration of the adiabatic theorem and a more formal proof of the Berry's phase are made. After this, it is shown that the Aharonov-Bohm effect can be explained in terms of the Berry's phase. The Berry's phase is also evidenced for a particle with spin in a region with a time-dependent magnetic field.

Keywords: Berry's phase, Aharonov-Bohm effect, adiabatic theorem, spin, quantum interference.

# Sumário

<b>1</b>	<b>A equação de Schrödinger para o potencial eletromagnético</b>	<b>11</b>
1.1	O potencial generalizado . . . . .	11
1.2	Equação de Schrödinger para o potencial eletromagnético . . . . .	13
1.3	Comentários acerca das transformações de gauge . . . . .	14
<b>2</b>	<b>O efeito Aharonov-Bohm</b>	<b>17</b>
2.1	Efeitos de interferência . . . . .	18
2.2	Efeito sobre as autoenergias . . . . .	24
<b>3</b>	<b>O teorema adiabático na mecânica quântica</b>	<b>28</b>
3.1	Alguns resultados da teoria de perturbação dependente do tempo . . . . .	29
3.2	O teorema adiabático . . . . .	32
<b>4</b>	<b>A fase de Berry</b>	<b>38</b>
4.1	A fase de Berry . . . . .	38
4.2	O efeito Aharonov-Bohm: um caso particular da fase de Berry . . . . .	43
4.3	Elétron sob a ação de um campo magnético em precessão . . . . .	46
4.3.1	O regime adiabático e a fase de Berry . . . . .	56
4.4	Fase geométrica para uma partícula com spin: o caso geral . . . . .	60
	<b>Apêndices</b>	<b>65</b>
	<b>A Sobre o potencial generalizado e a força de Lorentz</b>	<b>66</b>
	<b>B Sobre a invariância de gauge da equação de Schrödinger</b>	<b>68</b>
	<b>Referências bibliográficas</b>	<b>70</b>

# Introdução

Na mecânica clássica, o movimento dos corpos é completamente descrito por uma função horária real que é solução da segunda lei de Newton,  $\mathbf{r}(t)$ , enquanto na mecânica quântica, tudo que é possível saber está embutido na função de onda da partícula,  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , que é complexa. Pela experiência cotidiana, lidar com números reais é bastante familiar; o mesmo não vale para os números complexos, que possuem duas partes, uma real e uma imaginária. Essa dificuldade é sanada com a *interpretação probabilística*, postulada por Max Born. Segundo essa proposta, a quantidade  $\Psi^*(\mathbf{r}, t) \cdot \Psi(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$  representa a probabilidade de encontrar a partícula na redondeza imediata de  $\mathbf{r}$  no instante  $t$ . Entretanto, a função de onda  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , como qualquer número complexo, pode ser escrita em termos de seu módulo e fase,  $\Psi(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)| \exp [i\theta(\mathbf{r}, t)]$ , o que leva frequentemente à ingênua ideia de que a fase da função de onda não é importante, tendo em vista que a função densidade de probabilidade independe da fase. Todavia, ignorar a fase quântica equivale ignorar em boa parte, ou completamente, o caráter ondulatório da matéria - o que não é uma decisão muito sensata. Para mostrar que essa suposição está incorreta, seria razoável propor experimentos que envolvessem fenomenologia ondulatória, como o experimento de Young, também chamado de experimento da dupla fenda.

De fato, os experimentos de interferência quântica<sup>1</sup> endossam que a fase da função de onda pode ser observável. Essas verificações experimentais ressaltam a importância da fase

---

<sup>1</sup>Dentre esses experimentos temos: interferência de nêutrons induzida pela gravidade, verificada por R. Colella, A. Overhauser e S. A. Werner em 1975; interferência de nêutrons causada por um campo magnético, verificada por H. Rauch e outros também em 1975; e o efeito Aharonov-Bohm (que será discutido em breve) verificado em 1960 por R. G. Chambers.

da função de onda e fornecem razões para uma análise mais aprofundada. Vale atentar que efeitos de interferência têm origem na superposição de funções de onda que representam a mesma partícula. Classicamente, não é esperado que a afirmação anterior soe factível; pelo contrário, não faz sentido algum representar uma partícula pontual por duas funções de posição; é bastante comum, entretanto, descrever uma onda como a superposição de duas outras.

Pode-se realizar o experimento da dupla fenda com elétrons, nêutrons ou prótons, visto que esses também apresentam natureza ondulatória. O padrão de interferência observado no anteparo sugere que, depois das fendas, a função de onda do elétron é composta por duas partes: uma que representa o elétron 'passando' pela primeira fenda e outra que representa o elétron 'passando' pela segunda fenda, de modo tal que a função de onda do elétron no anteparo é uma *mistura* das duas possibilidades; a superposição das duas partes da função de onda fornece a distribuição de probabilidade de receber um elétron em a determinada região do anteparo, que representa o padrão de interferência observado. O padrão de interferência, ou melhor, a posição de seu centro, depende inteiramente da relação entre as fases das componentes da função de onda da partícula. Essa observação, à primeira vista trivial, é o ponto de partida das observações experimentais de efeitos de fase quântica. Em outras palavras, se for possível alterar a fase das componentes da função de onda de maneira desigual, ter-se-á um deslocamento do centro do padrão de interferência. Embora o escopo desse trabalho seja, de maneira resumida, discutir o efeito Aharonov-Bohm e relacionar o teorema adiabático com as fases de Berry, observações no que concerne à verificação experimental desses fenômenos são de extrema importância.

Discutir-se-á o efeito Aharonov-Bohm inicialmente, tendo em vista que este explicita a realidade física do potencial vetor, antes considerado apenas uma entidade matemática. Em seguida, uma digressão acerca do teorema adiabático faz-se indispensável para reproduzir o resultado encontrado por M. Berry em 1985. Esse resultado importantíssimo permite explicar inúmeros efeitos de fase quântica, dentre eles, o efeito Aharonov-Bohm, que há de

ser revisitado à luz daquele resultado.

# Capítulo 1

## A equação de Schrödinger para o potencial eletromagnético

Embora o efeito Aharonov-Bohm possa ser explicado em termos das fases de Berry, é bastante instrutivo discuti-lo previamente. O efeito proposto por Y. Aharonov e D. Bohm<sup>1</sup> em 1959, além de estar intimamente relacionado com as fases de Berry, fornece evidências conclusivas da realidade física ao potencial vetor. Todavia, antes de se enveredar pela descrição do efeito Aharonov-Bohm, é necessário entender algumas nuances do eletromagnetismo clássico, uma vez que o potencial envolvido da equação de Schrödinger tem natureza eletromagnética.

### 1.1 O potencial generalizado

O primeiro passo para a compreensão do efeito em questão é escrever a equação de Schrödinger para uma partícula carregada em uma região em que atua um campo eletromagnético. Para tanto, precisamos de um potencial que reproduza a força de Lorentz, a saber

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) . \quad (1.1.1)$$

---

<sup>1</sup>Algumas referências alegam que W. Ehrenberg e R. E. Siday discutiram o mesmo efeito 10 anos antes.

É possível mostrar que o seguinte potencial generalizado satisfaz esse requerimento (vide Apêndice A)

$$U(\mathbf{r}, t) = q[\phi(\mathbf{r}, t) - \mathbf{v} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)] , \quad (1.1.2)$$

onde  $q$ ,  $\phi$  e  $\mathbf{A}$  correspondem à carga da partícula, ao potencial escalar e ao potencial vetor, respectivamente. As componentes da força generalizada são encontradas da seguinte forma

$$F_j = -\frac{\partial U}{\partial q_j} + \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_j} \right) , \quad (1.1.3)$$

onde  $q_j$  e  $\dot{q}_j$  correspondem às coordenadas e velocidades generalizadas, respectivamente - usar-se-á coordenadas cartesianas.

Agora é possível escrever a Lagrangeana do problema. Da definição  $L = K - U$ , tem-se que

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - q[\phi(\mathbf{r}, t) - \mathbf{v} \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)] . \quad (1.1.4)$$

O hamiltoniano é encontrado a partir da *transformada de Legendre* de  $L$  nas variáveis  $\dot{q}_j$ , de forma que as variáveis relevantes passam a ser os  $q_j$  e os  $p_j$  - os últimos são os *momentos generalizados* ou *momentos canônicos*

$$H = \sum_{i=1}^3 p_i \dot{q}_i - L . \quad (1.1.5)$$

Os momentos canônicos  $p_j$  são obtidos da seguinte maneira

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} , \quad (1.1.6)$$

de modo que, para a componente  $x$ , temos

$$p_x = m\dot{x} + qA_x = (m\mathbf{v} + q\mathbf{A})_x , \quad (1.1.7)$$

o que permite escrever a  $\mathbf{v}$  em termos de  $\mathbf{p}$

$$\mathbf{v} = \frac{1}{m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A}) . \quad (1.1.8)$$

Com essas informação em mãos, podemos obter o hamiltoniano de maneira trivial

$$H = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^3 p_i(p_i - qA_i) - \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^3 (p_i - qA_i)^2 + q\phi - \frac{q}{m} \sum_{i=1}^3 (p_i - qA_i)A_i \quad (1.1.9)$$

$$= \frac{1}{m} \sum_{i=1}^3 (p_i - qA_i) \left[ p_i - \frac{1}{2}(p_i - qA_i) - qA_i \right] + q\phi \quad (1.1.10)$$

$$= \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^3 (p_i - qA_i)^2 + q\phi \quad (1.1.11)$$

$$= \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi . \quad (1.1.12)$$

Supondo que  $\mathbf{A}$  e  $\phi$  independem do tempo, vale afirmar que o hamiltoniano (1.1.2) representa a energia total do sistema - que é conservada.

## 1.2 Equação de Schrödinger para o potencial eletromagnético

Em um cenário quântico, faz-se necessário o uso da prescrição operatorial. Escrevamos a equação de Schrödinger independente do tempo e explicitemos os efeitos das operações como

2

$$H\psi(\mathbf{r}) = \left[ \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla \cdot -q\mathbf{A})(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}) + q\phi \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) , \quad (1.2.1)$$

---

<sup>2</sup>No presente cenário, efeitos de spin não serão levados em conta, porque  $\mathbf{B}$  é nulo na região permitida à partícula.

onde o operador momento  $\mathbf{p}$  é dado por

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla . \quad (1.2.2)$$

Observe que o operador momento, no primeiro termo entre parênteses da (1.2.1), gera uma divergência, enquanto usualmente produz um gradiente. O operador  $\mathbf{A}$  equivale ao produto escalar usual. Aplicando as derivadas do operador hamiltoniano, obtemos

$$H = \left[ \frac{1}{2m} \left( -\hbar^2\nabla^2 + i\hbar q\nabla \cdot \mathbf{A} + 2iq\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla + q^2\mathbf{A}^2 \right) + q\phi \right] . \quad (1.2.3)$$

Uma vez que consideramos  $\mathbf{A}$  e  $\phi$  independentes do tempo, podemos escrever finalmente a equação de Schrödinger dependente do tempo

$$H\Psi(\mathbf{r}, t) = \left[ \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial\Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} . \quad (1.2.4)$$

Observe que a eq. (1.2.4) reproduz a (1.2.1) caso tomemos

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})f(t), \quad \text{com} \quad f(t) = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) . \quad (1.2.5)$$

Note que a independência do hamiltoniano no tempo permite a separação das dependências temporal e espacial. Uma vez obtida a equação de Schrödinger dependente do tempo, é indispensável uma breve discussão com respeito às *transformações de gauge*.

### 1.3 Comentários acerca das transformações de gauge

Vimos que o hamiltoniano depende explicitamente dos potenciais  $\phi$  e  $\mathbf{A}$ ; contudo, mostraremos que existem infinitos potenciais que geram os campos  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{B}$ . Tal conclusão é bastante ameaçadora, visto que, para os mesmos campos, devemos ter inúmeros potenciais que os geram e, conseqüentemente, inúmeros hamiltonianos diferentes para o mesmo cenário

físico<sup>3</sup>. Para que possamos prosseguir legitimamente, comentemos sobre as *transformações de gauge*, também conhecidas como *transformações de calibre*.

Primeiramente, considere uma função escalar  $\Gamma(\mathbf{r}, t)$ , para qual vale o teorema de Schwartz, e os potenciais transformados  $\phi'$  e  $\mathbf{A}'$  dados por

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\Gamma \quad , \quad \phi' = \phi - \frac{\partial\Gamma}{\partial t} . \quad (1.3.1)$$

As equações de Maxwell para os campos  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{B}$ , gerados por  $\phi$  e  $\mathbf{A}$ , são

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} \quad , \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} . \quad (1.3.2)$$

Efetuada essas operações para  $\mathbf{E}'$  e  $\mathbf{B}'$ , a partir de  $\phi'$  e  $\mathbf{A}'$ , obtemos

$$\mathbf{E}' = -\nabla\phi' - \frac{\partial\mathbf{A}'}{\partial t} = -\nabla\phi + \nabla\left(\frac{\partial\Gamma}{\partial t}\right) - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t}(\nabla\Gamma) = -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} = \mathbf{E} , \quad (1.3.3)$$

$$\mathbf{B}' = \nabla \times \mathbf{A}' = \nabla \times (\mathbf{A} + \nabla\Gamma) = \nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B} , \quad (1.3.4)$$

que é sempre possível para potenciais-vetor bem comportados. Logo, existem infinitos potenciais  $\phi'$  e  $\mathbf{A}'$  que reproduzem os campos  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{B}$  - isso prova a proposição. Essa liberdade de escolha para os potenciais é chamada de *liberdade de gauge*, e a indiferença dos campos no que diz respeito às transformações (1.3.1) é chamada de *invariância de gauge*.

Vale ressaltar que podemos escolher  $\mathbf{A}'$  de modo que tenhamos<sup>4</sup>

$$\nabla \cdot \mathbf{A}' = \nabla \cdot \mathbf{A} + \nabla^2\Gamma = 0 , \quad (1.3.5)$$

que é satisfeita quando

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = -\nabla^2\Gamma . \quad (1.3.6)$$

---

<sup>3</sup>Oras, diferentes hamiltonianos, em geral, levam a diferentes situações físicas, autoenergias e autofunções, o que de maneira alguma é desejável.

<sup>4</sup>A escolha  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  caracteriza o *calibre de Coulomb*.

Agora podemos estudar o efeito dessas transformações sobre as autofunções e autoenergias do hamiltoniano transformado  $H'$ . Para tanto, consideremos que  $\Gamma$  é independente do tempo, de modo que possamos definir a seguinte função  $\Phi$ , tal que

$$\Phi(\mathbf{r}) = \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}), \quad (1.3.7)$$

onde  $\psi(\mathbf{r})$  é solução da equação de Schrödinger independente do tempo para os potenciais  $\phi$  e  $\mathbf{A}$ . A aplicação do hamiltoniano modificado  $H'$  sobre a função  $\Phi$ , após um trabalho algébrico tedioso presente no Apêndice B, fornece

$$H'\Phi = \exp\left(\frac{iq}{\hbar}\Gamma\right) \left\{ \frac{1}{2m} \left[ -\hbar^2\nabla^2 + i\hbar q\nabla \cdot \mathbf{A} + 2i\hbar q\mathbf{A} \cdot \nabla + q^2\mathbf{A}^2 \right] + q\phi \right\} \psi \quad (1.3.8)$$

$$H'\Phi = \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right) H\psi = E\Phi, \quad (1.3.9)$$

ou seja, as transformações de gauge apenas conferem um fator de fase  $\exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right)$  às autofunções  $\psi$  do operador  $H^5$ , escrito em termos dos potenciais não transformados  $\phi$  e  $\mathbf{A}$ , de modo que as autoenergias permanecem inalteradas. As transformações de gauge também não alteram a função densidade de probabilidade  $P = \|\psi\|^2 = \|\Phi\|^2$ , de modo que os valores esperados relevantes<sup>6</sup> permanecem inalterados.

---

<sup>5</sup>Observe que pelas (1.3.5-6) podemos escolher  $\mathbf{A}$  de modo a termos  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ , simplificando o hamiltoniano (1.2.3).

<sup>6</sup>Os valores esperados são calculados a partir de médias ponderadas, onde P assume o papel do peso. Além disso, a fase adicional é igual para todos os novos autoestados, ou seja, não há efeitos de interferência.

## Capítulo 2

# O efeito Aharonov-Bohm

Até recentemente<sup>1</sup>, os potenciais  $\phi$  e  $\mathbf{A}$  eram considerados apenas ferramentas matemáticas que facilitavam o manuseio das equações do eletromagnetismo. Classicamente, tal ideia nos levaria a crer que, se  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{B}$  fossem nulos, os potenciais não deveriam influenciar o sistema em questão, visto que *apenas* campos são diretamente observáveis. Entretanto, tal suposição é incorreta: o potencial vetor pode alterar o comportamento quântico do sistema mesmo em uma região onde  $\mathbf{B}$  é nulo<sup>2</sup>, como mostraram Y. Aharonov e D. Bohm.

O experimento consiste em dividir um feixe de partículas carregadas em dois, fazê-los passar um por cada lado de um solenóide e então recombiná-los. Como é sabido dos cursos de Física básica, quando um solenóide é suficientemente longo, o campo magnético é uniforme e confinado em seu interior, ou seja,  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{0}$  na região externa do solenóide. A figura 2.1 mostra um esquema do experimento de maneira simplificada. O potencial vetor  $\mathbf{A}$ , para essa configuração, é

$$\mathbf{A} = A_\phi \hat{\phi} = \frac{\Phi}{2\pi\rho} \hat{\phi}, \quad (\rho > b), \quad (2.0.1)$$

onde  $\Phi = \pi b^2 B$  é o fluxo de  $\mathbf{B}$  ao longo do solenóide. Observe que o potencial vetor é

---

<sup>1</sup>Y. Aharonov e D. Bohm publicaram o resultado em 1959.

<sup>2</sup>É possível mostrar que o potencial escalar  $\phi$  também é capaz de alterar o comportamento de sistemas físicos mesmo quando  $\mathbf{E}$  é nulo.

tangencial, o que tem relação com a simetria axial do sistema.

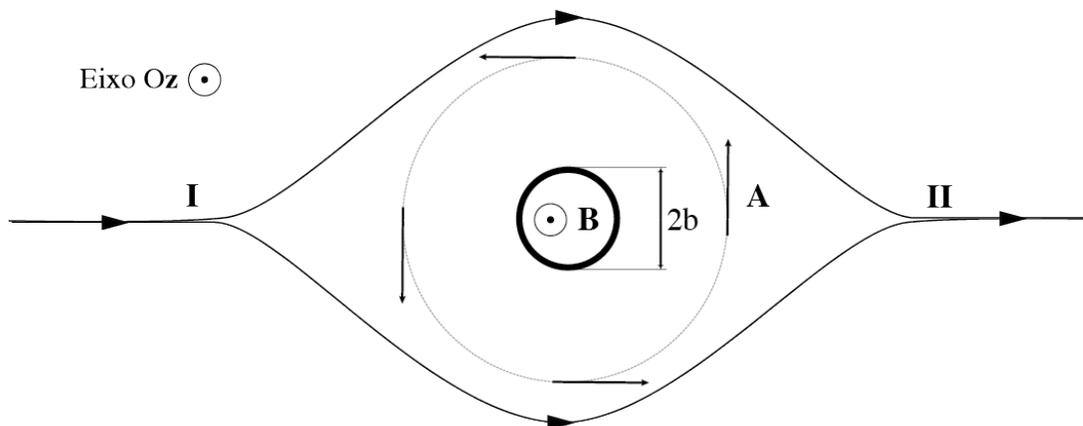


Figura 2.1: Vista superior simplificada dos caminhos percorridos pelos feixes. O campo  $\mathbf{B}$  está confinado dentro do solenóide, cuja seção é representada pela circunferência central em negrito.

## 2.1 Efeitos de interferência

De acordo com a Fig. 2.1, supondo que o solenóide seja neutro, pode-se escrever a equação de Schrödinger dependente do tempo para uma partícula de carga  $q$  na região externa do solenóide<sup>3</sup> como

$$H\Psi = \frac{1}{2m} \left( -\hbar^2 \nabla^2 + 2iq\hbar \mathbf{A} \cdot \nabla + q^2 \mathbf{A}^2 \right) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (2.1.1)$$

onde usamos que  $i\hbar \nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  porque  $A_\rho = A_z = 0$  e  $A_\phi = A_\phi(\rho)$ . A eq. (2.1.1) pode ser simplificada caso façamos a seguinte transformação

$$\Psi = \exp(i g(\mathbf{r})) \Psi', \quad (2.1.2)$$

<sup>3</sup>Por pura economia, omitimos deliberadamente o termo de potencial escalar da equação de Schrödinger (2.1.1). Entretanto, esse termo vai ser inserido quando revisitarmos o efeito Aharonov-Bohm no contexto das fases de Berry.

com  $g$  dado por

$$g(\mathbf{r}) = \frac{q}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' , \quad (2.1.3)$$

onde  $\mathbf{r}$  e  $\mathbf{r}_0$  podem ser escolhidos arbitrariamente. Escolhamos  $\mathbf{r}_0$  e  $\mathbf{r}$  de modo a coincidirem com  $I$  e  $II$ , respectivamente, e apliquemos o hamiltoniano sobre  $\Psi$ . Isso fornece

$$H\Psi = \frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \nabla \cdot \nabla [\exp(ig)\Psi'] + 2iq\hbar \mathbf{A} \cdot \nabla [\exp(ig)\Psi'] + q^2 \mathbf{A}^2 \exp(ig)\Psi' \right\} , \quad (2.1.4)$$

ou

$$H\Psi = \frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \nabla \cdot \left[ \exp(ig) (i\Psi' \nabla g + \nabla \Psi') \right] + 2iq\hbar \mathbf{A} \cdot \left[ \exp(ig) (i\Psi' \nabla g + \nabla \Psi') \right] + q^2 \mathbf{A}^2 \exp(ig)\Psi' \right\} . \quad (2.1.5)$$

Sabendo que

$$\nabla g = \frac{q}{\hbar} \mathbf{A} , \quad (2.1.6)$$

a (2.1.5) fornece

$$H\Psi = \frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \left[ \exp(ig) \left( i\frac{q}{\hbar} \Psi' \nabla \cdot \mathbf{A} + i\frac{q}{\hbar} \mathbf{A} \cdot \left( i\frac{q}{\hbar} \Psi' \mathbf{A} + \nabla \Psi' \right) + \nabla^2 \Psi' + i\frac{q}{\hbar} \mathbf{A} \cdot \nabla \Psi' \right) \right] + 2iq\hbar \mathbf{A} \cdot \left[ \exp(ig) \left( i\frac{q}{\hbar} \Psi' \mathbf{A} + \nabla \Psi' \right) \right] + q^2 \mathbf{A}^2 \exp(ig)\Psi' \right\} , \quad (2.1.7)$$

que pode ser escrita como

$$H\Psi = \exp(ig) \frac{1}{2m} \left\{ q^2 \Psi' \mathbf{A}^2 - iq\hbar \mathbf{A} \cdot \nabla \Psi' - \hbar^2 \nabla^2 \Psi' - iq\hbar \mathbf{A} \cdot \nabla \Psi' + 2iq\hbar \mathbf{A} \cdot \nabla \Psi' - q^2 \mathbf{A}^2 \Psi' \right\} , \quad (2.1.8)$$

ou

$$H\Psi = \exp(ig) \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi' = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar \exp(ig) \frac{\partial \Psi'}{\partial t} . \quad (2.1.9)$$

Em outras palavras, se conseguirmos resolver a equação diferencial (2.1.10), para  $\Psi'$ , basta que multipliquemos a solução obtida por  $\exp(i\mathbf{g}(\mathbf{r}))$  que obteremos  $\Psi$  da (2.1.2)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi' = i\hbar\frac{\partial\Psi'}{\partial t} . \quad (2.1.10)$$

Suponhamos que  $\Psi'$  tenha a forma

$$\Psi'(\rho, \phi, t) = \psi'(\rho, \phi)f(t) \quad , \quad \text{onde } \psi' = R(\rho)g(\phi) . \quad (2.1.11)$$

O método de separação de variáveis, já bastante conhecido, permite identificar  $f(t)$  imediatamente com

$$f(t) = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) , \quad (2.1.12)$$

de modo que temos a seguinte equação de Schrödinger independente do tempo a ser resolvida

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi'(\rho, \phi) = E\psi'(\rho, \phi) . \quad (2.1.13)$$

Aplicando o laplaciano sobre a função de onda, obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial\psi'}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\psi'}{\partial\phi^2}\right] = E\psi' \quad (2.1.14)$$

ou

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{g(\phi)}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{dR(\rho)}{d\rho}\right) + \frac{R(\rho)}{\rho^2}\frac{d^2g(\phi)}{d\phi^2}\right] = ER(\rho)g(\phi) , \quad (2.1.15)$$

que após a separação de variáveis fornece

$$\frac{1}{g(\phi)}\frac{d^2g(\phi)}{d\phi^2} = \rho^2\left[-\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{1}{\rho R(\rho)}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{dR(\rho)}{d\rho}\right)\right] = -k^2 , \quad (2.1.16)$$

onde  $k$  deve ser determinado pelas condições de contorno a serem satisfeitas por  $\psi'$ . A parte angular fornece

$$\frac{d^2 g(\phi)}{d\phi^2} = -k^2 g(\phi) , \quad (2.1.17)$$

ou seja

$$g(\phi) = \exp(ik\phi) , \quad (2.1.18)$$

que deve ser normalizada por um fator  $(2\pi)^{-\frac{1}{2}}$ . Contudo,  $g(\phi)$  deve satisfazer a condição geométrica

$$g(\phi) = g(\phi + 2n\pi) , \quad (2.1.19)$$

para garantir a unicidade de  $\psi'$ , o que imediatamente exige que  $k = l$ , com  $l$  inteiro. Essa condição influencia na parte radial da função de onda, que é obtida a partir da equação diferencial ordinária restante

$$\frac{d^2 R(\rho)}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR(\rho)}{d\rho} + \left( \alpha^2 - \frac{l^2}{\rho^2} \right) R(\rho) = 0 , \quad (2.1.20)$$

onde  $\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ . Fazendo  $\rho = \alpha r$ , temos que  $\frac{d}{d\rho} \rightarrow \alpha \frac{d}{dr}$  e a equação diferencial se torna

$$\frac{d^2 R_1(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR_1(r)}{dr} + \left( 1 - \frac{l^2}{r^2} \right) R_1(r) = 0 , \quad (2.1.21)$$

onde  $R_1(r) = R(\alpha r)$ . Esta é a famosa equação de Bessel do primeiro tipo, cujas soluções são as funções de Bessel, denotadas por

$$R(\rho) = J_l(\alpha\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{2^{2j+l} j! (l+j)!} (\alpha\rho)^{2j+l} . \quad (2.1.22)$$

Uma vez que o solenóide é impenetrável, a continuidade de  $\Psi$  deve ser satisfeita, de modo que devemos ter

$$R(b) = 0 = J_m(b\alpha) , \quad (2.1.23)$$

ou seja, as autoenergias são determinadas pelas raízes reais da função de Bessel. Vale notar que as autoenergias não dependem do fluxo magnético  $\Phi$  e, conseqüentemente, são indiferentes ao potencial vetor. Tem-se, portanto, apenas efeitos de interferência. A solução base para a equação diferencial (2.1.1) é dada por

$$\Psi_m = \exp(ig(\mathbf{r}))\Psi' = J_m(\alpha\rho) \exp \left[ i \left( g(\mathbf{r}) + m\phi - \frac{E_m}{\hbar}t \right) \right], \quad (2.1.24)$$

na qual

$$g(\mathbf{r}) = \frac{q}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_0C}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' . \quad (2.1.25)$$

Observemos que a condição  $\Psi_m(b) = 0$  exige que ponhamos índices no  $\alpha$ , uma vez que  $\Psi_m(\alpha_{mk}b) = 0$ , ou seja,  $\alpha_{mk}b$  é a  $k$ -ésima raiz da  $m$ -ésima função de Bessel. Dessa forma, a solução geral da (2.1.1) é uma combinação linear das funções  $\Psi_m$

$$\Psi = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} a_{mk} \Psi_m(\alpha_{mk}\rho) , \quad (2.1.26)$$

onde os  $a_{mk}$  são encontrados a partir das relações de ortogonalidade entre as funções de Bessel e as exponenciais complexas. Atentemos, por outro lado, que  $g(\mathbf{r})$  depende da escolha do caminho de integração, como veremos a seguir. Caso independesse, a circulação de  $\mathbf{A}$  em torno do solenóide deveria ser nula, o que claramente não acontece. Consideremos o caminho de integração ilustrado na Fig. 2.2. Calculando a circulação do potencial vetor a partir do teorema de Stokes, obtemos que

$$\oint \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' = \oint \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{A} = \oint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \Phi \neq 0 . \quad (2.1.27)$$

Isso mostra que o domínio em questão não é simplesmente conexo<sup>4</sup>, de modo que a integral de  $I$  a  $II$  depende de fato do caminho escolhido, mas mostremos que essa dependência é bem

---

<sup>4</sup>A grosso modo, um domínio simplesmente conexo é uma região do espaço sem buracos. Nesse caso, a região interna ao solenóide é impenetrável, de modo que essa região é inacessível aos elétrons, constituindo assim um buraco no domínio da função  $g$ . Esse fato por si só altera a *topologia* do sistema.

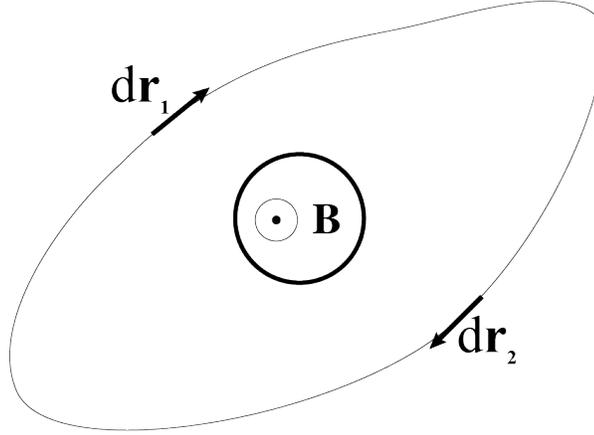


Figura 2.2: Um caminho de integração qualquer que envolve o solenóide.

menos complicada do que em geral se espera de uma integral desse tipo. Para mostrar isso, escrevamos os produtos  $\mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}_1$  e  $\mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}_2$

$$\mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}_1 = (A_\phi \hat{\phi}) \cdot (d\rho_1 \hat{\rho} + \rho_1 d\phi_1 \hat{\phi}) = \frac{\Phi}{2\pi\rho_1} \rho_1 d\phi_1 = \frac{\Phi}{2\pi} d\phi_1, \quad (2.1.28)$$

$$\mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}_2 = \frac{\Phi}{2\pi} d\phi_2. \quad (2.1.29)$$

Observemos, todavia, que  $d\phi_1 = -d\phi_2$ , o que implica diretamente em termos apenas dois valores possíveis para a fase  $\frac{g}{\hbar}$  adquirida nos trajetos

$$g_{I \rightarrow II} = \begin{cases} +\frac{g\Phi}{2\hbar} & , \text{ para o feixe no mesmo sentido de } \mathbf{A} \\ -\frac{g\Phi}{2\hbar} & , \text{ para o feixe no sentido contrário a } \mathbf{A} \end{cases} \quad (2.1.30)$$

De maneira similar ao que acontece no experimento da dupla fenda, a função de onda de cada elétron ao chegar em  $II$  é a *superposição das autofunções*  $\Psi_1$  e  $\Psi_2$ . Essas funções de onda, em  $II$ , diferem entre si apenas por um fator  $\exp(i\frac{g\Phi}{\hbar})$ . De fato, o arranjo da figura 2.3 permite observação direta de efeitos de interferência induzidos pela fase adicional  $g$ .

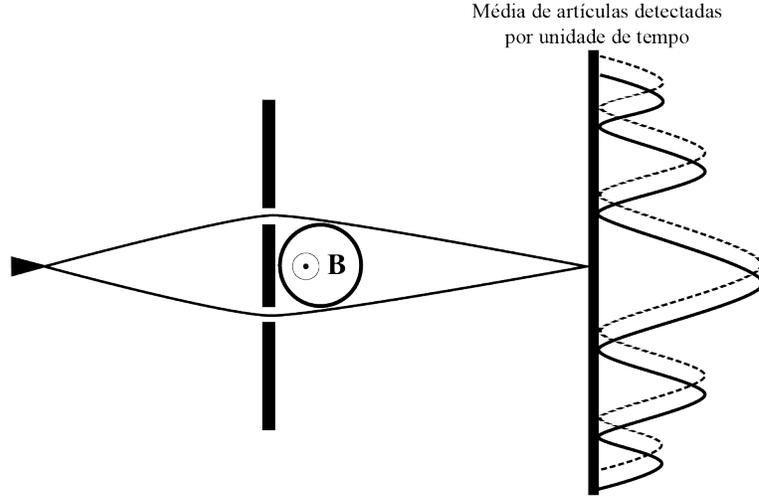


Figura 2.3: A fase adicional desloca o perfil da distribuição original (linha tracejada) para baixo (linha contínua). Caso o campo  $\mathbf{B}$  apontasse na direção  $-\hat{z}$ , as franjas seriam deslocadas para cima. Para obter a distribuição das partículas detectadas no anteparo são necessários muitos portadores de carga.

## 2.2 Efeito sobre as autoenergias

Para as configurações das figuras (2.1) e (2.3), o único efeito do potencial vetor sobre as autofunções de onda é o fator de fase  $g$ . Com isso em mente, torna-se claro (vide equações (2.1.23 e 2.1.24)) que o potencial vetor não tem efeito algum sobre as autoenergias do sistema. Todavia, o cenário físico é alterado caso os portadores de carga estejam confinados a uma distância fixa do solenóide, como na figura (2.4). Com  $\rho = R$  fixo, a função de onda possui dependência em  $\phi$  e  $t$ , apenas, e a transformação (2.1.2) é desnecessária. De acordo com essas considerações, a equação de Schrödinger (2.1.1), assume a forma

$$H\Psi(\phi, t) = \frac{1}{2m} \left( -\hbar^2 \nabla^2 + 2iq\hbar \mathbf{A} \cdot \nabla + q^2 \mathbf{A}^2 \right) \Psi(\phi, t) = ih \frac{\partial \Psi(\phi, t)}{\partial t}. \quad (2.2.1)$$

Novamente, supomos  $\Psi = \psi(\phi)f(t)$ , onde o fator  $f(t)$  é dado pela (2.1.12). Resta-nos então a seguinte equação diferencial

$$H\psi(\phi) = \frac{1}{2m} \left( -\hbar^2 \nabla^2 + 2iq\hbar \mathbf{A} \cdot \nabla + q^2 \mathbf{A}^2 \right) \psi(\phi) = E\psi(\phi). \quad (2.2.2)$$

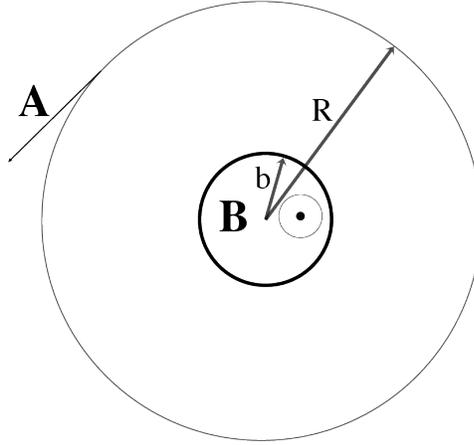


Figura 2.4: Portadores de carga confinados em um anel em torno do solenóide.

Usando o laplaciano em coordenadas cilíndricas e o campo  $\mathbf{A}$ , dado pela (2.0.1), temos

$$H\psi(\phi) = \frac{1}{2m} \left[ -\frac{\hbar^2}{R^2} \frac{d^2\psi(\phi)}{d\phi^2} + \frac{2iq\hbar A_\phi}{R} \frac{d\psi(\phi)}{d\phi} + q^2 A_\phi^2 \psi(\phi) \right] = E\psi(\phi) . \quad (2.2.3)$$

Com a ajuda da (2.0.1), façamos as seguintes redefinições

$$\beta = \frac{q\Phi}{2\pi\hbar} \quad \text{e} \quad \gamma = \frac{2mER^2}{\hbar^2} - \beta^2 , \quad (2.2.4)$$

usando-as na (2.2.3), temos

$$\frac{d^2\psi(\phi)}{d\phi^2} - 2i\beta \frac{d\psi(\phi)}{d\phi} + \gamma\psi(\phi) = 0 . \quad (2.2.5)$$

A equação diferencial (2.2.5) é linear e com coeficientes constantes, portanto sua solução tem a seguinte forma

$$\psi(\phi) = A \exp(i\alpha\phi) , \quad (2.2.6)$$

onde os  $\alpha$  são dados por

$$i\alpha_{\pm} = i \left( \beta \pm \sqrt{\frac{2mER^2}{\hbar^2}} \right) . \quad (2.2.7)$$

Podemos agora escrever a solução geral da equação (2.2.3)

$$\psi(\phi) = A \exp(i\alpha_+\phi) + B \exp(i\alpha_-\phi) . \quad (2.2.8)$$

Contudo, é necessário garantir a unicidade da função de onda. Para tanto,  $\psi(\phi)$  deve satisfazer a condição (2.1.19)

$$\psi(\phi) = \psi(\phi + 2n\pi) , \quad (2.2.9)$$

ou seja,  $\alpha_{\pm}$  deve ser inteiro.

A exigência  $\alpha_{\pm} = n$  tem influência direta na quantização da energia, cujos valores possíveis são dados por

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mR^2} \left( n - \frac{q\Phi}{2\pi\hbar} \right)^2 , \quad (2.2.10)$$

com  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ . Logo, qualquer combinação linear da forma (2.2.8) é solução da (2.2.3). De acordo com a (2.2.7), podemos escrever a solução base

$$\Psi_n(\phi, t) = \left[ A \exp(i\alpha_+\phi) + B \exp(i\alpha_-\phi) \right] \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right) , \quad (2.2.11)$$

bem como a solução geral, que é dada por<sup>5</sup>

$$\Psi = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \Psi_n . \quad (2.2.12)$$

Uma vez que o movimento é confinado em um plano<sup>6</sup>, podemos calcular o momento angular na direção  $z$  para cada autoestado. Em coordenadas cilíndricas, o operador que fornece essa informação é

$$L_z = -i\hbar \frac{d}{d\phi} . \quad (2.2.13)$$

---

<sup>5</sup>Os coeficientes  $c_n$  são encontrados de maneira similar à (2.1.26).

<sup>6</sup>O confinamento da partícula em um plano é, a rigor, irrealizável, visto que, pela relação de incerteza  $2\Delta p_z \Delta z \geq \hbar$ , ter-se-ia uma incerteza muito grande no momento  $p_z$ , que violaria a hipótese de confinamento em um plano. Portanto, deve-se permitir que a partícula mova-se *bem pouco* na direção  $\hat{z}$ , o que pode ser feito assumindo um potencial restaurador que dependa de  $z$ , como o do oscilador harmônico.

Aplicando-o na (2.1.24) ou na (2.2.11), obtemos uma equação da forma

$$L_z \Psi_n = n\hbar \Psi_n , \quad (2.2.14)$$

que está de acordo com as regras de quantização do momento angular.

É bastante claro que, na ausência de fluxo, as autofunções  $\Psi_n$  são degeneradas<sup>7</sup> aos pares, exceto o estado fundamental ( $n = 0$ ), dada a dependência das autoenergias em  $n^2$ . A inclusão do potencial vetor tão somente é capaz de quebrar essa degenerescência, o que fornece meios diretos de verificação experimental. A quantização da energia ocorre simplesmente porque se tomou  $\rho = R$  fixo. Quando fixamos  $\rho$ , não foi necessário eliminar  $\mathbf{A}$  do hamiltoniano, situação que é bem diferente daquela em que  $\rho$  é variável independente, que exige a eliminação de  $\mathbf{A}$  do hamiltoniano por meio da (2.1.2) para facilitar o manuseio da equação diferencial parcial.

Em ambos os casos é difícil superestimar o significado físico dos resultados; é deveras impressionante que as partículas saibam que existe um potencial vetor, muito embora em momento algum sintam qualquer campo magnético - outrora o último era considerado a única influência física sobre a partícula. Esse experimento evidencia que o potencial vetor possui uma realidade física, pois gera efeitos observáveis sobre as funções de onda. Trata-se de um efeito puramente topológico, visto que é possível distinguir elétrons por suas fases adquiridas ao longo do caminho que percorrem. A descoberta desses efeitos, bem como o estudo de *fases geométricas*, que têm inúmeras aplicações na Física, renderam ao Físico israelense Yakir Aharonov e ao Físico inglês Michael Berry o prêmio Wolf de Física<sup>8</sup> de 1998.

---

<sup>7</sup>Autofunções são ditas degeneradas quando estão associadas ao mesmo autovalor, no caso a energia  $E_n$ .

<sup>8</sup>E entrega do prêmio Wolf é realizada anualmente em Israel, pela Wolf Foundation, fundada por Ricardo Wolf, que veio a ser embaixador de Cuba em Israel. O prêmio engloba seis categorias, a saber, Agricultura, Química, Matemática, Medicina, Física e Artes. O último inclui Arquitetura, Música, Pintura e Escultura.

## Capítulo 3

# O teorema adiabático na mecânica quântica

Por puro acaso, nos capítulos anteriores, lidamos com um hamiltoniano independente do tempo. Quando o hamiltoniano depende do tempo, pouquíssimos casos podem ser resolvidos analiticamente<sup>1</sup>, de maneira tal que métodos aproximativos tornam-se uma ferramenta valiosa. Uma das mais elementares, contudo de valor inestimável, é o *teorema adiabático*.

As aplicações do teorema são inúmeras, mas nesse trabalho tentaremos nos resumir a estudar a relação entre o teorema adiabático e as *fases geométricas*, introduzidas por M. Berry em 1984. Ilustraremos relações com o efeito Aharonov-Bohm e mostraremos que se trata apenas de um caso particular das *fases de Berry*. Nesse capítulo inicial o objetivo é demonstrar o teorema adiabático.

O teorema adiabático envolve situações em que os hamiltonianos evoluem muito lentamente no tempo. Dessa maneira, precisamos entender como os kets de estado evoluem no tempo e como podemos escrevê-los em termos dos autokets conhecidos. Para tanto, todavia, precisamos de resultados importantes vindos da teoria de perturbação dependente do tempo.

---

<sup>1</sup>O poço de potencial que expande com velocidade constante, por exemplo. Vide D. Griffiths em *Introduction to Quantum Mechanics*.

### 3.1 Alguns resultados da teoria de perturbação dependente do tempo

A evolução temporal de kets sob a ação de hamiltonianos dependentes do tempo é muito díspar do caso independente do tempo: enquanto naquele os autokets apenas ganham um fator de fase  $-i\frac{E}{\hbar}t$ , nesse há a possibilidade de transição para outros autokets (do hamiltoniano inicial). Tal fato é consequência direta da mudança do Hamiltoniano com o tempo - mas claro! se o hamiltoniano muda com o tempo, o mesmo vale para seus autokets instantâneos, que devem ser escritos como combinações lineares instantâneas dos kets do hamiltoniano não perturbado<sup>2,3</sup>.

A pergunta que precisa ser respondida é: dado que em  $t_0 = 0$  o sistema se encontra *com certeza* no estado  $n$  do hamiltoniano  $H(t_0 = 0)$ , qual combinação linear (das autofunções do hamiltoniano não-perturbado) o descreve após um tempo  $t$ ?

O primeiro passo é escrever o hamiltoniano que, nesse caso, apresenta dependência temporal da forma

$$H(t) = H_0 + H'(t) , \quad (3.1.1)$$

com  $H'(t) \ll H_0 \forall t$  e  $H_0$  dependente da posição apenas, para que caiba uma teoria de perturbação (para o teorema adiabático, essa hipótese não é de fato necessária, o crucial é que o hamiltoniano mude de maneira extremamente lenta com o tempo).

Sabemos que as autofunções do hamiltoniano não perturbado satisfazem

$$\langle \Psi_i^0(\mathbf{r}, t) | \Psi_j^0(\mathbf{r}, t) \rangle = \delta_{ij} , \quad (3.1.2)$$

onde  $\Psi_i^0(\mathbf{r}, t) = \psi_i^0(\mathbf{r}) \exp\left(-i\frac{E_i}{\hbar}t\right)$ , bem como a equação de Schrödinger independente do tempo, que é

$$H_0\psi_i^0(\mathbf{r}, t) = E_i^0\psi_i^0(\mathbf{r}, t) . \quad (3.1.3)$$

---

<sup>2</sup>As autofunções do hamiltoniano não perturbado obviamente devem ser bem conhecidas.

<sup>3</sup>Isso é óbvio, visto que a base do hamiltoniano não perturbado é completa.

Por outro lado, a equação de Schrödinger é válida para qualquer hamiltoniano, de modo que temos

$$H(t)\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}. \quad (3.1.4)$$

A função de onda  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  pode ser escrita como uma combinação linear das autofunções do hamiltoniano não perturbado<sup>4</sup>

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_i c_i(t) \Psi_i^0(\mathbf{r}, t) = \sum_i c_i(t) \psi_i^0(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_i}{\hbar} t\right). \quad (3.1.5)$$

Inserindo as (3.1.1), (3.1.3) e (3.1.5) na (3.1.4), obtemos

$$\left[ H_0 + H'(t) \right] \sum_i c_i(t) \Psi_i^0(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_i c_i(t) \Psi_i^0(\mathbf{r}, t), \quad (3.1.6)$$

que pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \sum_i E_i^0 c_i(t) \Psi_i^0(\mathbf{r}, t) + \sum_i H'(t) c_i(t) \Psi_i^0(\mathbf{r}, t) = \\ i\hbar \sum_i \left[ \dot{c}_i(t) \Psi_i^0(\mathbf{r}, t) - i \frac{E_i}{\hbar} c_i(t) \Psi_i^0(\mathbf{r}, t) \right] \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

ou

$$\sum_i H'(t) c_i(t) \Psi_i^0(\mathbf{r}, t) = i\hbar \sum_i \dot{c}_i(t) \Psi_i^0(\mathbf{r}, t). \quad (3.1.8)$$

Podemos usar a ortonormalidade entre as autofunções  $\Psi_i^0(\mathbf{r}, t)$ . Caso apliquemos o produto interno pela direita por uma certa  $\Psi_j^0(\mathbf{r}, t)$ , obtemos

$$\dot{c}_j(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_i c_i(t) \langle \Psi_j^0(\mathbf{r}, t) | H'(t) | \Psi_i^0(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (3.1.9)$$

---

<sup>4</sup>Observe que nesse caso os coeficientes da combinação linear dependem do tempo.

Por outro lado, o operador  $H'(t)$  é hermitiano, o que nos permite escrever

$$\langle \Psi_j^0(\mathbf{r}, t) | H'(t) | \Psi_i^0(\mathbf{r}, t) \rangle = H'_{ji}(t) = [H'_{ij}(t)]^* . \quad (3.1.10)$$

Conseqüentemente, a (3.1.9) assume a forma

$$\dot{c}_j(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_i c_i(t) H'_{ji}(t) . \quad (3.1.11)$$

Caso explicitemos as dependências temporais das funções de onda  $\Psi_i^0(\mathbf{r}, t)$ , podemos escrever<sup>5</sup>

$$\dot{c}_j(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_i c_i(t) \widetilde{H}'_{ji}(t) \exp \left[ i \frac{(E_j - E_i)}{\hbar} t \right] , \quad (3.1.12)$$

onde

$$\widetilde{H}'_{ji}(t) = \langle \psi_j^0(\mathbf{r}) | H'(t) | \psi_i^0(\mathbf{r}) \rangle . \quad (3.1.13)$$

A (3.1.12) representa inúmeras equações diferenciais acopladas - o caminho para solução analítica, se existir, é uma *via crucis*. Uma saída possível é abrir mão de uma solução analítica e usar aproximações em primeira ordem pelo menos<sup>6</sup>. De acordo com o método padrão, a aproximação em ordem zero consiste em simplesmente ignorar a dependência temporal do hamiltoniano, de modo que os coeficientes da expansão se tornam

$$\begin{cases} c_j(t) = 1 & , \text{ para } j = n \\ c_j(t) = 0 & , \text{ para } j \neq n . \end{cases} \quad (3.1.14)$$

Uma aproximação em primeira ordem adota os resultados da aproximação em ordem zero,

---

<sup>5</sup>Desde que  $H'(t)$  comute consigo em tempos diferentes.

<sup>6</sup>Esse tipo de procedimento é usado muito frequentemente por John R. Taylor no livro *Classical Mechanics* publicado pela *University Science Books*.

de modo que obtemos

$$\begin{cases} \dot{c}_j(t) = -\frac{i}{\hbar} \widetilde{H}'_{jj}(t) & , \text{ para } j = n \\ \dot{c}_j = 0 & , \text{ para } j \neq n . \end{cases} \quad (3.1.15)$$

A integração da (3.1.15) fornece imediatamente o coeficiente  $c_n(t)$ , sob a condição  $c_j(0) = \delta_{nj}$ ,

$$c_n(t) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \widetilde{H}'_{nn}(t') dt' . \quad (3.1.16)$$

Para os outros coeficientes  $c_m$ , com  $m \neq n$ , podemos substituir a (3.1.16) na (3.1.12), o que permite escrever

$$\dot{c}_m(t) = -\frac{i}{\hbar} \widetilde{H}'_{mn}(t) \exp \left[ i \frac{(E_m - E_n)}{\hbar} t \right] , \quad (3.1.17)$$

que dá, sob a condição  $c_j(0) = \delta_{nj}$ ,

$$c_m(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \widetilde{H}'_{mn}(t') \exp \left[ i \frac{(E_m - E_n)}{\hbar} t' \right] dt' . \quad (3.1.18)$$

As aproximações em ordens superiores utilizam as (3.1.16) e (3.1.18) de volta na (3.1.12), e assim sucessivamente. Esses resultados representam o conhecimento mínimo que se deve ter (sobre a teoria de perturbação dependente do tempo) para que se possa enveredar pela demonstração do teorema adiabático.

## 3.2 O teorema adiabático

É inevitável se perguntar em que sentido a palavra *adiabático* está sendo empregada nesse contexto. Nos textos usuais de Termodinâmica, a palavra é usada para descrever um processo em que não há troca de calor entre o sistema e suas redondezas. Aqui, entretanto, essa palavra apenas serve para designar um processo que ocorre muito lentamente; no presente caso, representa a variação extremamente lenta de um hamiltoniano  $H_0 = H(t = 0)$  até um hamiltoniano  $H(T) = H(t = T > 0)$ .

Ilustremos esse cenário com um sistema bastante familiar: o oscilador harmônico quântico no estado fundamental<sup>7</sup>. A distribuição de probabilidades é uma gaussiana centrada na origem. Caso permitamos a ação de um campo elétrico uniforme (na direção  $+\hat{x}$ ), que cresce muito lentamente com o tempo de  $E(0) = 0$  até  $E(T > 0) = E > 0$ , a distribuição de probabilidades possui a mesma forma da anterior, mas se encontrará deslocada  $d = -\frac{eE}{\omega_0^2 m}$  com respeito à origem - que corresponde à distribuição do estado fundamental do hamiltoniano final. Ou seja, desde que o campo elétrico varie muito lentamente com o tempo, o sistema sai do estado fundamental do hamiltoniano  $H(0)$  e, depois de um tempo  $T$ , encontrar-se-á no estado fundamental do hamiltoniano  $H(T)$ . Se a mudança for súbita, o estado final será composto por uma combinação linear (complicada) das autofunções do hamiltoniano  $H(T)$ . A figura 3.1 ilustra essas situações. A figura 3.1 e as discussões anteriores sugerem que o

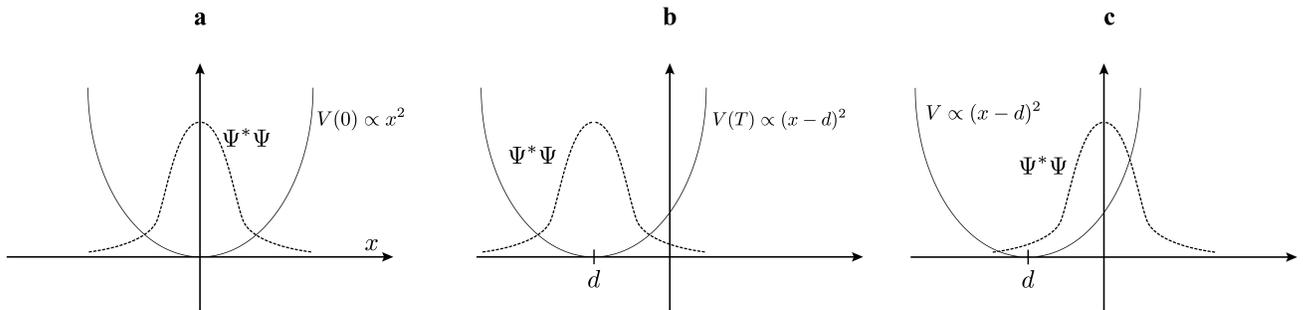


Figura 3.1: De (a) para (b) há um processo adiabático, enquanto de (a) para (c) a mudança no hamiltoniano é brusca. Observe que no primeiro processo a partícula permanece no estado fundamental, enquanto no segundo o estado final deve ser escrito como uma combinação linear não trivial das autofunções do hamiltoniano  $H(T)$ .

teorema adiabático pode ser enunciado como

“Se uma partícula encontra-se *com certeza* no  $n$ -ésimo autoestado de um hamiltoniano  $H(0) = H_0$ , essa há de ser levada até o  $n$ -ésimo estado do hamiltoniano  $H(T) = H_f$ <sup>8</sup>, sob a condição de que a mudança no hamiltoniano ocorra *adiabaticamente*.”

A demonstração do teorema é mais complexa do que a simplicidade que seu enunciado

<sup>7</sup>Escolhamos um elétron como a massa do sistema massa-mola.

<sup>8</sup>Assumiremos que o espectro do hamiltoniano é discreto e não degenerado, mas essas condições não são de fato necessárias: o teorema vale mesmo sob essas condições, basta que escolhamos os autoestados *bons* para o uso da teoria de perturbação.

sugere. Vejamos. Para que tenhamos *certeza* de que o  $n$ -ésimo autoestado de  $H_0$  vai ser levado ao autoestado correspondente de  $H_f$ , temos de mostrar que

$$\langle \psi_m^f | \Psi(T) \rangle = \begin{cases} 1 & , \text{ para } m = n \\ \text{ou que} & \\ 0 & , \text{ para } m \neq n , \end{cases} \quad (3.2.1)$$

onde  $\psi_m^f$  é o  $m$ -ésimo autoestado do hamiltoniano final  $H_f$ , enquanto  $\Psi(T)$  é a função de onda que evolui sob o efeito do hamiltoniano  $H(t)$  até  $t = T$ <sup>9</sup>. Isso significa dizer que  $\langle \psi_m^f | \Psi(T) \rangle$  é não nulo apenas quando  $\psi_m^0$  coincidir com  $\psi_n^f$ , ou seja, quando a autofunção final corresponder à  $n$ -ésima autofunção do hamiltoniano  $H(T)$ .

Antes de avançarmos, suponhamos que a parcela do hamiltoniano com dependência temporal é

$$H'(t) = H(t) - H_0 = Vf(t) , \quad (3.2.2)$$

na qual  $f(0) = 0$ ,  $f(T) = 1$  e

$$\frac{df}{dt} \ll 1 \quad \forall t \mid 0 < t < T . \quad (3.2.3)$$

Suponhamos também que o sistema inicialmente está no estado  $\psi_n^0$  e que  $V$  é pequeno<sup>10</sup>; a última suposição sugere que usemos teoria de perturbação independente do tempo para calcular a correção em primeira ordem da autofunção  $\psi_m^f$ <sup>11</sup>, dada por

$$\psi_m^f \cong \psi_m^0 + \sum_{j \neq m} \frac{V_{jm}}{E_m - E_j} \psi_j^0 , \quad (3.2.4)$$

onde  $V_{jm} = \langle \psi_j^0 | V | \psi_m^0 \rangle$ . Agora precisamos invocar os resultados da seção anterior para

---

<sup>9</sup>A rigor, o autoestado  $\psi_m^f$  representa apenas a parte espacial da função de onda completa. Contudo, os hamiltonianos iniciais e finais são supostamente conhecidos, bem como suas soluções, de modo que podemos omitir o fator de fase sem comprometer a relação de ortonormalidade.

<sup>10</sup>Essa condição vai ser aliviada posteriormente.

<sup>11</sup>Aqui infelizmente não cabe um estudo de teoria de perturbação independente do tempo, por isso apenas citamos o resultado.

calcular como estado  $\Psi_n^0$  evolui no tempo. Aproximações em primeira ordem, de acordo com as (3.1.16) e (3.1.18), fornecem

$$\Psi(t) = \sum_j c_j(t) \psi_j^0 \exp\left(-i \frac{E_j^0}{\hbar} t\right), \quad (3.2.5)$$

onde

$$\begin{cases} c_n(t) \cong 1 - \frac{i}{\hbar} V_{nn} \int_0^t f(t') dt' & , \text{ para } j = n \\ c_j(t) \cong -\frac{i}{\hbar} V_{jn} \int_0^t f(t') \exp\left[i \frac{(E_j - E_n)}{\hbar} t'\right] dt' & , \text{ para } j \neq n . \end{cases} \quad (3.2.6)$$

Observe que identificamos  $\widetilde{H}'_{jn}(t')$  com  $V_{jn} f(t')$ .

A primeira integral na (3.2.6) pode ser reescrita em termos da área  $S$  sob a curva de  $f(t)$  entre 0 e  $t$

$$c_n(t) \cong 1 - \frac{i}{\hbar} V_{nn} S(t), \quad (3.2.7)$$

enquanto a segunda pode ser simplificada por meio de uma integração por partes

$$c_j(t) \cong -\frac{V_{jn}}{(E_j - E_n)} \left\{ f(t') \exp\left[i \frac{(E_j - E_n)}{\hbar} t'\right] \Big|_{t'=0}^{t'=t} - \int_0^t \frac{df(t')}{dt'} \exp\left[i \frac{(E_j - E_n)}{\hbar} t'\right] dt' \right\}. \quad (3.2.8)$$

A hipótese (3.2.3), bem como os valores extremos de  $f(t)$ , permitem estimar os termos dados pela (3.2.8)

$$c_j(t) \cong -\frac{V_{jn}}{(E_j - E_n)} f(t) \exp\left[i \frac{(E_j - E_n)}{\hbar} t\right] \quad j \neq n. \quad (3.2.9)$$

Podemos, então, escrever a (3.2.5) da seguinte forma

$$\Psi(T) \cong \left\{ \left[1 - \frac{i}{\hbar} V_{nn} S(T)\right] \psi_n^0 - \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{(E_k - E_n)} \psi_k^0 \right\} \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} T\right). \quad (3.2.10)$$

Visto que a (3.2.10) e a (3.2.4) estão em termos das autofunções do hamiltoniano não perturbado, podemos fazer uso das relações de ortonormalidade. A partir da (3.2.1), fazendo

uso da (3.2.4), temos

$$\langle \psi_m^f | \Psi(T) \rangle = \left\langle \psi_m^0 + \sum_{j \neq m} \frac{V_{jm}}{E_m - E_j} \psi_j^0 \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} V_{nn} S(T) \right] \psi_n^0 - \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{(E_k - E_n)} \psi_k^0 \right\rangle \exp \left( -i \frac{E_n}{\hbar} T \right), \quad (3.2.11)$$

que, para  $m = n$ , equivale a

$$\langle \psi_n^f | \Psi(T) \rangle = \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} V_{nn} S(T) + \sum_{j \neq n} \frac{|V_{jn}|^2}{(E_j - E_n)^2} \right] \exp \left( -i \frac{E_n}{\hbar} T \right), \quad (3.2.12)$$

enquanto o caso em que  $m \neq n$  fornece

$$\langle \psi_m^f | \Psi(T) \rangle = \left\{ -\frac{V_{mn}}{(E_m - E_n)} + \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} V_{nn} S(T) \right] \frac{V_{mn}}{E_m - E_n} - \sum_{n \neq k \neq m} \frac{V_{mj} V_{jn}}{(E_m - E_j)(E_j - E_n)} \right\} \exp \left( -i \frac{E_n}{\hbar} T \right), \quad (3.2.13)$$

que por sua vez vale

$$\langle \psi_m^f | \Psi(T) \rangle = - \left\{ i \frac{V_{nm} V_{nn}}{\hbar (E_m - E_n)} S(T) + \sum_{n \neq k \neq m} \frac{V_{mj} V_{jn}}{(E_m - E_j)(E_j - E_n)} \right\} \exp \left( -i \frac{E_n}{\hbar} T \right). \quad (3.2.14)$$

Oras, já deixamos de levar em conta termos de ordem superior (proporcionais a  $V^2$  ou menores), logo, devemos desconsiderá-los novamente. Isso nos leva a escrever

$$\langle \psi_m^f | \Psi(T) \rangle = \begin{cases} \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} V_{nn} S(T) \right] \exp \left( -i \frac{E_n}{\hbar} T \right) & , \text{ para } m = n \\ 0 & , \text{ para } m \neq n, \end{cases} \quad (3.2.15)$$

que implica imediatamente em

$$|\langle \psi_m^f | \Psi(T) \rangle|^2 = \delta_{mn} , \quad (3.2.16)$$

onde ignoramos novamente contribuições em segunda ordem. Em outras palavras, a função de onda  $\Psi(T)$  corresponde ao estado  $\psi_n^0$ . Isso mostra o teorema adiabático.

Alguns pontos da demonstração são dignos de nota. O primeiro deles é a importância da hipótese da mudança extremamente lenta do hamiltoniano: apenas sob essa condição é possível desprezar correções de ordens superiores nas expressões das amplitudes de transição (3.2.15-16). O segundo: observemos que o aumento  $V$  do hamiltoniano  $H_0$  pode ser executado em  $N$  processos, de modo que o teorema adiabático valha em todos eles; uma vez aceito isso, podemos aliviar a restrição de que  $V$  é pequeno. Finalmente, note que a (3.2.15) (no que diz respeito aos casos em que  $m \neq n$ ) garante que a probabilidade de transição (3.2.16) para outros estados, que não o  $n$ -ésimo de  $H(T)$ , é de quarta ordem em  $V$  - porque a amplitude de transição é de segunda ordem na perturbação. Dessa forma, torna-se claro que a probabilidade de transmissão é negligível. É a (3.2.15), com  $m \neq n$ , que fornece a informação fundamental contida no teorema adiabático.

O teorema adiabático é de fundamental importância no estudo das fases de Berry, que compõem o próximo capítulo.

# Capítulo 4

## A fase de Berry

A fase de Berry é o análogo quântico das fases de Hannay, cujo caso mais conhecido se refere a um pêndulo simples na superfície do globo terrestre. Nesse cenário, caso movamos o pêndulo muito lentamente ao longo de um caminho fechado na superfície do globo terrestre, o ângulo relativo dos planos inicial e final de oscilação equivale ao ângulo sólido que o caminho fechado compreende (com respeito ao centro do planeta). Como no caso clássico, o hamiltoniano deve satisfazer a condição  $H(t_0 + T) = H(t_0)$  e deve variar adiabaticamente no tempo.

Nesse capítulo, a pergunta que devemos responder é: o que acontece com a função de onda da partícula em um processo dessa natureza? Algumas digressões são necessárias.

### 4.1 A fase de Berry

Antes de definir a fase de Berry, façamos uma digressão acerca da evolução temporal dos kets de estado. O primeiro passo é estender a dependência temporal não apenas aos hamiltonianos e autokets, mas às autoenergias, que passam a ser ademais *instantâneas*.

Uma maneira de englobar essa e outras situações mais complexas é permitir que a dependência temporal do hamiltoniano, dos autokets e das autoenergias seja paramétrica em  $t$ , ou

seja, que esses assumam as formas:  $H(\mathbf{R}(t))$ ,  $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$  e  $E_n(\mathbf{R}(t))$ <sup>1</sup>, o penúltimo representa o  $n$ -ésimo autoket de energia.

Em um determinado instante  $t$  *fixo*, a equação Schrödinger *independente do tempo*<sup>2</sup> deve ser satisfeita

$$H(\mathbf{R}(t))|n(\mathbf{R}(t))\rangle = E_n(\mathbf{R}(t))|n(\mathbf{R}(t))\rangle . \quad (4.1.1)$$

Por outro lado, a equação de Schrödinger dependente do tempo para o ket  $|n(\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}_o), t_0 = 0 ; t \rangle$ <sup>3</sup> é

$$H(\mathbf{R}(t))|n(\mathbf{R}_o), t_0 = 0 ; t \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n(\mathbf{R}_o), t_0 = 0 ; t \rangle . \quad (4.1.2)$$

Caso permitamos que o hamiltoniano mude muito lentamente com o tempo, a partícula há de permanecer no  $n$ -ésimo autoestado do hamiltoniano  $H(\mathbf{R}(t))$ . Isso sugere que a evolução do ket presente na (4.1.2) seja<sup>4</sup>

$$\begin{aligned} |n(\mathbf{R}_o), t_0 = 0 ; t \rangle \propto \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_0^t H(\mathbf{R}(t')) dt' \right) |n(\mathbf{R}(t))\rangle = \\ \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt' \right) |n(\mathbf{R}(t))\rangle , \quad (4.1.3) \end{aligned}$$

onde usamos o fato de que o hamiltoniano deve, ao ser aplicado sobre o ket  $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$ , fornecer a  $n$ -ésima energia (daquele hamiltoniano em  $t$ ) como função do tempo. Em outras palavras, a exponencial da (4.1.3) conta por todas as evoluções temporais infinitesimais<sup>5</sup>. Observe que a (4.1.3) representa uma relação de *proporcionalidade*. Para transformá-la em uma igualdade,

<sup>1</sup>Esse caso engloba o mais simples:  $\mathbf{R}(t) = t$ . Observe que  $\mathbf{R}(t)$  representa um vetor com quantas componentes forem necessárias - cada componente é uma função de  $t$ .

<sup>2</sup>Isso apenas é válido porque  $t$  foi fixado. Portanto, a (4.1.1) apenas vale para aquele  $t$ .

<sup>3</sup>Esse ket corresponde ao ket presente na (4.1.1), depois de calculado em  $t_0 = 0$  e então evoluído temporalmente até  $t$ .

<sup>4</sup>A (4.1.3) inclui o operador evolução temporal para o caso em que o hamiltoniano apresenta dependência temporal e comuta consigo em tempos diferentes.

<sup>5</sup>Em uma evolução temporal infinitesimal, o hamiltoniano é *quase* constante no tempo, de modo que a evolução temporal ao longo de um  $t$  *finito* deve ser dada pela integral presente na (4.1.3).

nota-se que todos os kets em questão são normalizados, logo, devemos escrever

$$|n(\mathbf{R}_o), t_0 = 0 ; t \rangle = \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(R(t')) dt' \right) \exp(i\gamma_n(t)) |n(\mathbf{R}(t)) \rangle, \quad (4.1.4)$$

onde o fator de fase  $\exp(i\gamma(t))$  foi incluso *apenas* para estabelecer a igualdade. Esse fator pode conter informações físicas ou não: de uma maneira ou doutra, o teorema adiabático não exclui a possibilidade de um fator dessa natureza, visto que a partícula ainda se encontra no  $n$ -ésimo estado do hamiltoniano final. No decorrer do desenvolvimento, a relevância desse fator pode ser evidenciada ou descartada. Da (4.1.4) na (4.1.2), tem-se que

$$H(\mathbf{R}(t)) |n(\mathbf{R}_o), t_0 = 0 ; t \rangle = E_n(\mathbf{R}(t)) \left[ \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(R(t')) dt' \right) \exp(i\gamma_n(t)) \right] |n(\mathbf{R}(t)) \rangle, \quad (4.1.5)$$

onde usamos a (4.1.1). O lado direito da (4.1.1), calculado para o ket (4.1.4), fornece<sup>6</sup>

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n(\mathbf{R}_o), t_0 = 0 ; t \rangle = i\hbar \left\{ \left( -\frac{i}{\hbar} E_n(R(t)) + i \frac{d\gamma_n(t)}{dt} \right) |n(\mathbf{R}(t)) \rangle + |\nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}(t)) \rangle \cdot \frac{d\mathbf{R}(t)}{dt} \right\} \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(R(t')) dt' \right) \exp(i\gamma_n(t)). \quad (4.1.6)$$

Considerando a (4.1.1), nota-se que os lados direitos das (4.1.5) e (4.1.6) são iguais, o que permite escrever

$$0 = i \frac{d\gamma_n(t)}{dt} |n(\mathbf{R}(t)) \rangle + |\nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}(t)) \rangle \cdot \frac{d\mathbf{R}(t)}{dt}, \quad (4.1.7)$$

que é simplificada caso apliquemos o bra  $\langle n(\mathbf{R}(t)) |$  pela esquerda

$$\frac{d\gamma_n(t)}{dt} = i \langle n(\mathbf{R}(t)) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}(t)) \rangle \frac{d\mathbf{R}(t)}{dt}, \quad (4.1.8)$$

---

<sup>6</sup>A rigor, o operador  $\nabla_{\mathbf{R}}$  age sobre a função de onda  $\langle \mathbf{r} | n(\mathbf{R}) \rangle$ , que é um escalar. Por economia, trabalharemos apenas com os kets de estado durante essa demonstração.

onde foi usado que  $\langle n(\mathbf{R}(t)) | n(\mathbf{R}(t)) \rangle = 1$ .

Percebe-se imediatamente que  $\gamma_n(t)$  é dado pela integral de linha

$$\gamma_n(t) = i \int_{\mathbf{R}_0}^{\mathbf{R}(t)} \langle n(\mathbf{R}(t')) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}(t')) \rangle \cdot d\mathbf{R}(t'), \quad (4.1.9)$$

cujos integrando é complexo, visto que

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{R}} \left( \langle n(\mathbf{R}(t')) | n(\mathbf{R}(t')) \rangle \right) &= \langle n(\mathbf{R}(t')) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}(t')) \rangle \\ &+ \langle \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}(t')) | n(\mathbf{R}(t')) \rangle = 0, \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

o que só é possível se  $\langle n(\mathbf{R}(t')) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}(t')) \rangle$  for imaginário. Agora teremos de lançar mão da periodicidade do hamiltoniano. Essa hipótese consiste em supor que  $\mathbf{R}(t)$  retorne a  $\mathbf{R}_0$  após um tempo  $T$ , ou equivalentemente, que o hamiltoniano  $H(t)$  retorne a  $H_0$  em  $t = T$ . Sob essas condições, a integral (4.1.9) se torna uma integral de caminho fechado  $C^T$

$$\gamma_n(C) = i \oint_C \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle \cdot d\mathbf{R}, \quad (4.1.11)$$

que, pelo teorema de Stokes, pode ser escrita como o fluxo

$$\gamma_n(C) = i \int_{S(C)} \nabla_{\mathbf{R}} \times \left[ \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle \right] \cdot d\mathbf{S}. \quad (4.1.12)$$

Agora é possível escrever a (4.1.4), com  $t = T$ , da seguinte forma

$$|n(\mathbf{R}_0), t_0 = 0; T \rangle = \exp \left( - \frac{i}{\hbar} \int_0^T E_n(R(t')) dt' \right) \exp(i\gamma_n(C)) |n(\mathbf{R}_0) \rangle, \quad (4.1.13)$$

onde

$$\gamma_n(C) = i \oint_C \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle \cdot d\mathbf{R} \quad (4.1.14)$$

---

<sup>7</sup>Observe que a dependência deixa de ser temporal e passa a ser puramente *geométrica*:  $\gamma_n$  depende do caminho  $C$  percorrido no *espaço das coordenadas paramétricas*.

é conhecida como a *fase de Berry*, que *depende* do caminho percorrido no espaço das coordenadas paramétricas<sup>8</sup> e que, em geral *não é nula*<sup>9</sup>.

Há outra maneira de expressar a (4.1.14). De acordo com o teorema de Stokes, pode-se escrever

$$\gamma_n(C) = i \int_C \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle \cdot d\mathbf{R} = - \int_S \text{Im} [\nabla_{\mathbf{R}} \times (\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle)] \cdot d\mathbf{S}, \quad (4.1.15)$$

onde se explicitou que  $\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle$  é imaginário puro. Definamos

$$\mathbf{V}_n(\mathbf{R}) = \text{Im} [\nabla_{\mathbf{R}} \times (\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle)], \quad (4.1.16)$$

que, fazendo uso da identidade  $\nabla \times (f \nabla g) = \nabla f \times \nabla g$ , pode ser escrita da seguinte forma

$$\mathbf{V}_n(\mathbf{R}) = \text{Im} [\langle \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) | \times | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle], \quad (4.1.17)$$

ou ainda, fazendo uso da relação de completeza,

$$\sum_m |m\rangle \langle m| = \mathbb{I},$$

como

$$\mathbf{V}_n(\mathbf{R}) = \text{Im} \left[ \sum_{m \neq n} \langle \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) | m(\mathbf{R}) \rangle \times \langle m(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle \right], \quad (4.1.18)$$

onde se omitiu o termo com  $n = m$ , tendo em vista que  $\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle$  é imaginário puro.

A tarefa agora é calcular o termo  $\langle m(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle$ , o que é possível a partir aplicação de  $\nabla_{\mathbf{R}}$  em ambos os lados da (4.1.1), ou seja

$$[\nabla_{\mathbf{R}} H(\mathbf{R})] |n(\mathbf{R})\rangle + H(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle = [\nabla_{\mathbf{R}} E_n(\mathbf{R})] |n(\mathbf{R})\rangle + E_n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle. \quad (4.1.19)$$

<sup>8</sup>Por isso essa fase também recebe o nome de fase *geométrica*.

<sup>9</sup>Caso as autofunções sejam puramente reais, a fase de Berry é nula.

Fazendo o produto interno da 4.1.19 com o bra  $\langle m|$ , obtemos

$$\langle m(\mathbf{R})|[\nabla_{\mathbf{R}}H(\mathbf{R})]|n(\mathbf{R})\rangle + E_m(\mathbf{R})\langle m(\mathbf{R})|\nabla_{\mathbf{R}}n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R})\langle m(\mathbf{R})|\nabla_{\mathbf{R}}n(\mathbf{R})\rangle, \quad (4.1.20)$$

que equivale a

$$\langle m(\mathbf{R})|\nabla_{\mathbf{R}}n(\mathbf{R})\rangle = \frac{\langle m(\mathbf{R})|[\nabla_{\mathbf{R}}H(\mathbf{R})]|n(\mathbf{R})\rangle}{E_n(\mathbf{R}) - E_m(\mathbf{R})}. \quad (4.1.21)$$

A hermiticidade de  $H(\mathbf{R})$  garante que

$$\langle \nabla_{\mathbf{R}}n(\mathbf{R})|m(\mathbf{R})\rangle = \frac{\langle n(\mathbf{R})|[\nabla_{\mathbf{R}}H(\mathbf{R})]|m(\mathbf{R})\rangle}{E_n(\mathbf{R}) - E_m(\mathbf{R})}. \quad (4.1.22)$$

Logo,  $\mathbf{V}_n(\mathbf{R})$  assume a forma

$$\mathbf{V}_n(\mathbf{R}) = \text{Im} \left\{ \sum_{m \neq n} \frac{\langle n(\mathbf{R})|[\nabla_{\mathbf{R}}H(\mathbf{R})]|m(\mathbf{R})\rangle \times \langle m(\mathbf{R})|[\nabla_{\mathbf{R}}H(\mathbf{R})]|n(\mathbf{R})\rangle}{[E_n(\mathbf{R}) - E_m(\mathbf{R})]^2} \right\}. \quad (4.1.23)$$

Com essas conclusões, estamos em condições de revisitar o efeito Aharonov-Bohm à luz do discutido acerca das fases de Berry.

## 4.2 O efeito Aharonov-Bohm: um caso particular da fase de Berry

É possível mostrar que a fase envolvida no efeito Aharonov-Bohm (e em muitos outros) é apenas um caso particular de fase de Berry. Para isso, precisamos escolher  $\mathbf{R}(t)$  de modo a satisfazer as condições requeridas na seção anterior. A suspeita é que  $\mathbf{R}(t)$  esteja relacionada com a posição da partícula com respeito ao solenóide.

No capítulo 2, vimos que o aparato experimental divide o feixe de elétrons e os faz percorrer os caminhos de  $I$  a  $II$ , conforme figura (2.1). Podemos dizer que cada elétron se encontra confinado em uma caixa cúbica que se move em volta do solenóide<sup>10</sup> (fig. 4.1) -

<sup>10</sup>O potencial escalar ignorado na (2.1.1) é responsável por confinar as partículas nessas caixas, ou melhor,

adotemos um *loop* qualquer que envolva o solenóide. Caso adotemos  $\mathbf{R}(t)$  como a posição do centro da caixa e o caminho fechado como um *loop* em volta do solenóide, aquelas condições são satisfeitas. Dito isso, podemos escrever a fase de Berry adquirida durante o processo.

A função de onda para essa configuração é dada pela (2.1.2), ou seja

$$\langle \mathbf{r} | n(\mathbf{R}(t)) \rangle = \exp(ig(\mathbf{r})) \Psi'_n, \quad (4.2.1)$$

onde  $\Psi'$  satisfaz a equação de schrödinger para a partícula na caixa *na ausência do potencial vetor* e  $g(\mathbf{r})$  é dada pela (2.1.3).

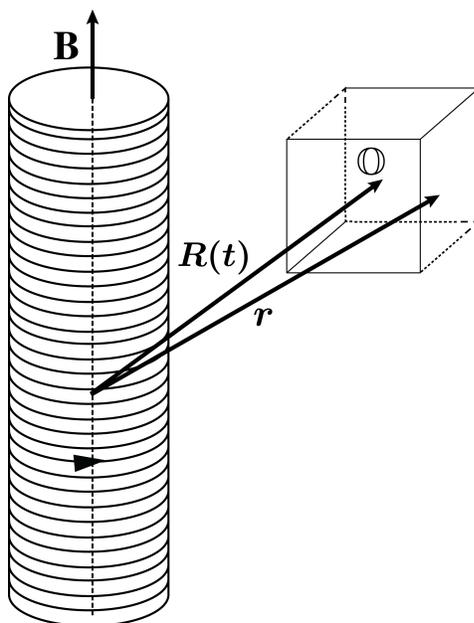


Figura 4.1: Partícula em uma caixa cúbica em volta de um solenóide muito longo.

Contudo, estamos interessados em calcular a quantidade  $\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle$ . Mas isso é fácil: basta que usemos a relação de completude para autokets de observáveis com espectros contínuos, fazendo

$$\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle = \int \langle n(\mathbf{R}) | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle d^3 r' = \int \langle n(\mathbf{R}) | \mathbf{r}' \rangle \nabla_{\mathbf{R}} \left[ \langle \mathbf{r}' | n(\mathbf{R}) \rangle \right] d^3 r', \quad (4.2.2)$$

---

por manter o feixe de partículas *coeso*, no contexto experimental.

que fornece

$$\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle = \int \Psi' \left( -i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \Psi'_n + \nabla_{\mathbf{R}} \Psi'_n \right) d^3 r' . \quad (4.2.3)$$

Aqui cabe uma consideração importantíssima: a partícula está confinada em uma *caixa*<sup>11</sup>. Sob essa condição, deve-se incluir um potencial  $V = V(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ <sup>12</sup> na (2.1.1) ou na (2.1.10), de modo que a função de onda  $\Psi'$  é, na verdade,  $\Psi'(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ , o que permite escrever o segundo termo da integral como

$$\nabla_{\mathbf{R}} \Psi'_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = -\nabla \Psi'_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) , \quad (4.2.4)$$

onde o gradiente  $\nabla$  atua sobre as coordenadas de  $\mathbf{r}$ . Essas considerações permitem obter

$$\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle = -i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{R}) - \int \Psi'_n \nabla \Psi'_n d^3 r' . \quad (4.2.5)$$

O último termo é proporcional ao valor esperado do momento da partícula dentro da caixa, que é nulo, logo,

$$\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle = -i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{R}) , \quad (4.2.6)$$

de modo que a fase de Berry acumulada no ciclo é

$$\gamma_n(C) = i \oint_C \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle \cdot d\mathbf{R} = \frac{e}{\hbar} \oint_C \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} . \quad (4.2.7)$$

Por outro lado, o teorema de Stokes permite dizer que a integral no lado direito da (4.2.7) vale o fluxo do campo magnético pelo solenóide ( $C$  contém a seção transversal do solenóide), logo,

$$\gamma_n(C) = \frac{e\Phi}{\hbar} , \quad (4.2.8)$$

o que nos diz que a fase de Berry adquirida no processo é a mesma para qualquer autofunção e é independente do caminho percorrido em volta do solenóide, contanto que o caminho o

<sup>11</sup>A caixa nessa situação significa apenas uma região onde a partícula está confinada. A caixa não precisa ser cúbica, basta que confine a partícula.

<sup>12</sup>Isso significa dizer que o potencial  $V$ , que confina a partícula na caixa, deve depender apenas da posição da partícula com respeito ao centro da caixa.

envolva. Esse resultado é completamente compatível com a discussão realizada no capítulo 2, o que é congruente com o fato da fase adquirida pela função de onda (2.1.24) ser uma fase de Berry.

### 4.3 Elétron sob a ação de um campo magnético em precessão

O teorema adiabático e a fase de Berry são bem ilustrados na descrição de um elétron sob a ação de um campo magnético em precessão, vide figura (4.2).

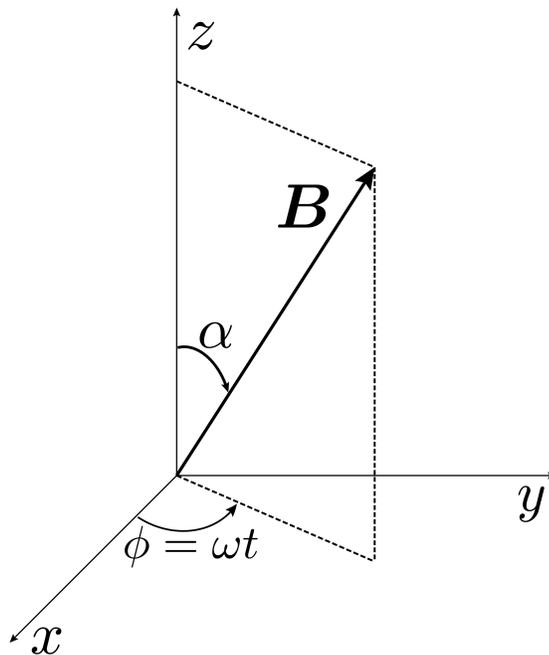


Figura 4.2: Campo magnético em precessão.

O campo magnético precessa em torno do eixo  $z$  e a partícula interage apenas com este. O campo  $\mathbf{B}(t)$  é dado por

$$\mathbf{B}(t) = B_0(\sin \alpha \cos \omega t, \sin \alpha \sin \omega t, \cos \omega t), \quad (4.3.1)$$

na qual  $B_0$  é o módulo do campo magnético, que é constante.

O hamiltoniano da interação é dado por

$$H = -\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\mu} = -\mathbf{B} \cdot \left(\frac{-e}{2m}g\right)\mathbf{S}, \quad (4.3.2)$$

onde  $g$  é a razão giromagnética do elétron, que é muito próxima de 2. Com essa consideração, é possível escrever

$$H = \frac{e}{m}\mathbf{B} \cdot \mathbf{S}. \quad (4.3.3)$$

É sabido que o produto escalar  $\mathbf{B} \cdot \mathbf{S}$  pode ser escrito em termos das matrizes de Pauli. Para tanto, escreve-se  $\mathbf{S}$  como

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x \hat{\mathbf{x}} + \sigma_y \hat{\mathbf{y}} + \sigma_z \hat{\mathbf{z}}), \quad (4.3.4)$$

em que

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.3.5)$$

de modo que o hamiltoniano é escrito como

$$H = \frac{e\hbar}{m} \sum_{i=1}^3 B_i \sigma_i = \frac{\omega_1 \hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \alpha & e^{-i\omega t} \sin \alpha \\ e^{i\omega t} \sin \alpha & -\cos \alpha \end{pmatrix}, \quad (4.3.6)$$

onde se identificou  $\omega_1 = \frac{eB_0}{m}$  com a *frequência de Larmor*.

Observe que o hamiltoniano da interação é dependente do tempo, de modo que a evolução temporal não é tão simples quanto a do caso independente do tempo. Com respeito ao último caso, o sistema permanece no mesmo autoestado em que começou, apenas ganhando um fator de fase dependente do tempo - a fase dinâmica da evolução temporal. No cenário em questão, entretanto, o estado evoluído,  $|\chi(t)\rangle$ , deve satisfazer a equação de Schrödinger dependente do tempo e, em geral, transita entre os autoestados com o passar do tempo.

Embora  $|\chi(t)\rangle$  não seja necessariamente um autoestado de  $H$ , é possível definir *autoestados instantâneos* cujos spins estão alinhados com o campo magnético num instante  $t$ . Fixemos  $t$ ,

façamos  $\omega t \rightarrow \phi$  e diagonalizemos  $H$ .

O hamiltoniano a ser diagonalizado é

$$H = \frac{\omega_1 \hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \alpha & e^{-i\phi} \sin \alpha \\ e^{i\phi} \sin \alpha & -\cos \alpha \end{pmatrix}, \quad (4.3.7)$$

que, no instante  $t$  deve apresentar autovalores  $E_{\pm} = \pm \frac{\hbar \omega_1}{2}$ .

Proponhamos autoestados instantâneos

$$|\chi_+\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \text{ e } |\chi_-\rangle = \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix}, \quad (4.3.8)$$

para os quais valem as relações de autovalor

$$H|\chi_{\pm}\rangle = E_{\pm}|\chi_{\pm}\rangle. \quad (4.3.9)$$

Para o autovalor  $E_+$ , tem-se que

$$\frac{\omega_1 \hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \alpha & e^{-i\phi} \sin \alpha \\ e^{i\phi} \sin \alpha & -\cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \frac{\omega_1 \hbar}{2} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad (4.3.10)$$

ou seja

$$\begin{pmatrix} x \cos \alpha + y e^{-i\phi} \sin \alpha \\ x e^{i\phi} \sin \alpha - y \cos \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad (4.3.11)$$

cuja primeira componente leva a

$$y = \frac{e^{i\phi}(1 - \cos \alpha)}{\sin \alpha} x. \quad (4.3.12)$$

Ao se escolher  $x = \cos \frac{\alpha}{2}$ , tem-se que

$$y = \frac{e^{i\phi}(1 - \cos \alpha)}{2 \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2}} \cos \frac{\alpha}{2} = e^{i\phi} \sin \frac{\alpha}{2}, \quad (4.3.13)$$

onde se usou que  $\sin^2 \frac{\alpha}{2} = \frac{1 - \cos \alpha}{2}$ .

Isso permite escrever

$$|\chi_+(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \\ e^{i\omega t} \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}. \quad (4.3.14)$$

De modo semelhante, para o autovalor  $E_-$ , temos

$$\begin{pmatrix} v \cos \alpha + w e^{-i\phi} \sin \alpha \\ v e^{i\phi} \sin \alpha - w \cos \alpha \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} v \\ w \end{pmatrix}, \quad (4.3.15)$$

cujas segunda componente leva a

$$v = \frac{e^{-i\phi}(-1 + \cos \alpha)}{\sin \alpha} w. \quad (4.3.16)$$

Escolhendo  $w = \cos \frac{\alpha}{2}$ , tem-se que

$$v = -\sin \frac{\alpha}{2} e^{-i\phi}, \quad (4.3.17)$$

que leva a

$$|\chi_-(t)\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\alpha}{2} e^{-i\omega t} \\ \cos \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}. \quad (4.3.18)$$

Os autoestados instantâneos  $|\chi_{\pm}(t)\rangle$  são equivalentes aos  $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$  na (4.1.1).

Observe que esses estados não são soluções da equação de Schrödinger dependente do tempo. É necessário resolvê-la exatamente (sim, é possível) para relacionarmos sua solução com os autoestados e então aplicar o teorema adiabático e o que foi discutido acerca da fase

de Berry. Para resolvê-la, consideremos um spinor qualquer cujas componentes dependam do tempo

$$|\chi(t)\rangle = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}. \quad (4.3.19)$$

A equação de Schrödinger dependente do tempo fornece

$$H|\chi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\chi(t)\rangle = \frac{\omega_1 \hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \alpha & e^{-i\omega t} \sin \alpha \\ e^{i\omega t} \sin \alpha & -\cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}, \quad (4.3.20)$$

que gera o seguinte par de equações diferenciais acopladas

$$\frac{\omega_1}{2} \begin{pmatrix} a \cos \alpha + b e^{-i\omega t} \sin \alpha \\ a e^{i\omega t} \sin \alpha - b \cos \alpha \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix}, \quad (4.3.21)$$

cuja derivada no tempo fornece

$$\frac{\omega_1}{2} \begin{pmatrix} \dot{a} \cos \alpha - i\omega b e^{-i\omega t} \sin \alpha + \dot{b} e^{-i\omega t} \sin \alpha \\ i\omega a e^{i\omega t} \sin \alpha + \dot{a} e^{i\omega t} \sin \alpha - \dot{b} \cos \alpha \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} \ddot{a} \\ \ddot{b} \end{pmatrix}. \quad (4.3.22)$$

O objetivo por ora é encontrar uma equação diferencial para a componente  $a(t)$  - mas poderia ser para  $b(t)$ . Começemos por substituir a segunda componente na primeira da (4.3.21) para eliminar  $b(t)$  e  $\dot{b}(t)$

$$\frac{\omega_1}{2} \left\{ \dot{a} \cos \alpha - i\omega \left( \frac{2i}{\omega_1} \dot{a} - a \cos \alpha \right) + e^{-i\omega t} \sin \alpha \left( -i \frac{\omega_1}{2} \right) (a e^{i\omega t} \sin \alpha - b \cos \alpha) \right\} = i \ddot{a}. \quad (4.3.23)$$

Cabe agora substituir novamente  $b(t)$  da primeira componente da (4.3.21) na (4.3.23), o que fornece

$$\frac{\omega_1}{2} \left\{ \dot{a} \left( \cos \alpha + 2 \frac{\omega}{\omega_1} \right) + i\omega a \cos \alpha - i a \frac{\omega_1}{2} \sin^2 \alpha + i \frac{\omega_1}{2} \cos \alpha \left( \frac{2i}{\omega_1} \dot{a} - a \cos \alpha \right) \right\} = i \ddot{a}, \quad (4.3.24)$$

que, após um leve exercício algébrico, torna-se

$$\ddot{a}(t) + i\omega\dot{a}(t) - \frac{\omega_1}{2}(\omega \cos \alpha - \frac{\omega_1}{2})a(t) = 0, \quad (4.3.25)$$

cujas soluções é encontrada a partir da proposta

$$a(t) = e^{\beta t}, \quad (4.3.26)$$

que leva a

$$\beta^2 + i\omega\beta - \frac{\omega_1}{2}(\omega \cos \alpha - \frac{\omega_1}{2})\beta = 0, \quad (4.3.27)$$

cujas soluções são

$$\beta = \frac{-i\omega \pm i\Gamma}{2}, \quad (4.3.28)$$

onde  $\Gamma = \sqrt{\omega^2 + \omega_1^2 - 2\omega\omega_1 \cos \alpha}$ .

A solução geral de  $a(t)$  é, portanto

$$a(t) = \left[ A \exp\left(i\frac{\Gamma}{2}t\right) + B \exp\left(-i\frac{\Gamma}{2}t\right) \right] \exp\left(-i\frac{\omega}{2}t\right). \quad (4.3.29)$$

A função  $b(t)$  é facilmente encontrada devido ao acoplamento com  $a(t)$ . Da (4.3.29) na primeira componente da (4.3.21) tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\omega_1}{2} \left\{ \left[ A \exp\left(i\frac{\Gamma}{2}t\right) + B \exp\left(-i\frac{\Gamma}{2}t\right) \right] \exp\left(i\frac{\omega}{2}t\right) \cos \alpha + b e^{-i\omega t} \sin \alpha \right\} = \\ i \left\{ i\frac{\Gamma}{2} \left[ A \exp\left(i\frac{\Gamma}{2}t\right) - B \exp\left(-i\frac{\Gamma}{2}t\right) \right] \right. \\ \left. - i\frac{\omega}{2} \left[ A \exp\left(i\frac{\Gamma}{2}t\right) + B \exp\left(-i\frac{\Gamma}{2}t\right) \right] \right\} \exp\left(i\frac{\omega}{2}t\right), \quad (4.3.30) \end{aligned}$$

que, depois de se reagrupar os termos, é equivalente a

$$b(t) = -\frac{1}{\sin \alpha} \left\{ \left[ \cos \alpha + \frac{(\Gamma - \omega)}{\omega_1} \right] A \exp \left( i \frac{\Gamma}{2} t \right) + \left[ \cos \alpha - \frac{(\Gamma + \omega)}{\omega_1} \right] B \exp \left( i \frac{\Gamma}{2} t \right) \right\} \exp \left( i \frac{\omega}{2} t \right). \quad (4.3.31)$$

As constantes  $A$  e  $B$  são determinadas a partir de condições iniciais. Para determiná-las, suponhamos que o sistema começa no autoestado  $|\chi_+(0)\rangle$ , isso equivale a

$$|\chi(0)\rangle = \begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} = |\chi_+(0)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \\ \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}, \quad (4.3.32)$$

ou seja

$$\begin{pmatrix} A + B \\ -\frac{1}{\sin \alpha} \left\{ \left[ \cos \alpha + \frac{(\Gamma - \omega)}{\omega_1} \right] A + \left[ \cos \alpha - \frac{(\Gamma + \omega)}{\omega_1} \right] B \right\} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \\ \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}, \quad (4.3.33)$$

cuja segunda componente permite escrever

$$-\sin \frac{\alpha}{2} \sin \alpha = \cos \alpha (A + B) + \frac{\Gamma}{\omega_1} (A - B) - \frac{\omega}{\omega_1} (A + B), \quad (4.3.34)$$

que, fazendo uso da primeira componente, equivale a

$$-\sin \frac{\alpha}{2} \sin \alpha = \cos \alpha \cos \frac{\alpha}{2} + \frac{\Gamma}{\omega_1} (2A - \cos \frac{\alpha}{2}) - \frac{\omega}{\omega_1} \cos \frac{\alpha}{2}, \quad (4.3.35)$$

ou a

$$-(\cos \frac{\alpha}{2} \cos \alpha + \sin \frac{\alpha}{2} \sin \alpha) + \frac{\omega}{\omega_1} \cos \frac{\alpha}{2} = \frac{\Gamma}{\omega_1} (2A - \cos \frac{\alpha}{2}). \quad (4.3.36)$$

O primeiro termo entre parênteses da (4.3.36) corresponde a  $\cos \frac{\alpha}{2}$ , de modo que esta se torna

$$\frac{\omega_1}{\Gamma} \left( -1 + \frac{\omega}{\omega_1} \right) \cos \frac{\alpha}{2} = 2A - \cos \frac{\alpha}{2}, \quad (4.3.37)$$

que leva a

$$A = \frac{1}{2} \cos \frac{\alpha}{2} \left( 1 + \frac{(\omega - \omega_1)}{\Gamma} \right). \quad (4.3.38)$$

O coeficiente  $B$  vem imediatamente da primeira componente da (4.3.33)

$$B = \frac{1}{2} \cos \frac{\alpha}{2} \left( 1 - \frac{(\omega - \omega_1)}{\Gamma} \right). \quad (4.3.39)$$

Os coeficientes  $A$  e  $B$  permitem então escrever os coeficientes  $a(t)$  e  $b(t)$ . Calculemos  $a(t)$ .

A aplicação desses valores em  $a(t)$  fornece imediatamente

$$a(t) = \cos \frac{\alpha}{2} \left[ \cos \frac{\Gamma}{2} t + i \frac{(\omega - \omega_1)}{\Gamma} \sin \frac{\Gamma}{2} t \right] \exp \left( -i \frac{\omega}{2} t \right). \quad (4.3.40)$$

Encontrar  $b(t)$  é um pouco mais trabalhoso, embora trivial. A aplicação dos valores de  $A$  e  $B$  na (4.3.31) fornece, a princípio

$$b(t) = -\frac{\cos \frac{\alpha}{2}}{4 \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2}} \left\{ \left[ \cos \alpha + \frac{(\Gamma - \omega)}{\omega_1} \right] \left( 1 + \frac{(\omega - \omega_1)}{\Gamma} \right) \exp \left( i \frac{\Gamma}{2} t \right) + \left[ \cos \alpha - \frac{(\Gamma + \omega)}{\omega_1} \right] \left( 1 - \frac{(\omega - \omega_1)}{\Gamma} \right) \exp \left( i \frac{\Gamma}{2} t \right) \right\} \exp \left( i \frac{\omega}{2} t \right), \quad (4.3.41)$$

na qual a aplicação dos produtos fornece

$$b(t) = -\frac{1}{4 \sin \frac{\alpha}{2}} \left\{ 2 \cos \alpha \cos \frac{\Gamma}{2} t + 2i \frac{(\omega - \omega_1)}{\Gamma} \cos \alpha \sin \frac{\Gamma}{2} t + \frac{(\Gamma - \omega) \exp \left( i \frac{\Gamma}{2} t \right) - (\Gamma + \omega) \exp \left( -i \frac{\Gamma}{2} t \right)}{\omega_1} + (\omega - \omega_1) \left[ \frac{(\Gamma - \omega) \exp \left( i \frac{\Gamma}{2} t \right) + (\Gamma + \omega) \exp \left( -i \frac{\Gamma}{2} t \right)}{\Gamma \omega_1} \right] \right\} \exp \left( i \frac{\omega}{2} t \right), \quad (4.3.42)$$

que por sua vez equivale a

$$b(t) = -\frac{1}{4 \sin \frac{\alpha}{2}} \left\{ 2 \cos \alpha \cos \frac{\Gamma}{2} t + 2i \frac{(\omega - \omega_1)}{\Gamma} \cos \alpha \sin \frac{\Gamma}{2} t + 2i \frac{\Gamma}{\omega_1} \sin \frac{\Gamma}{2} t - 2 \frac{\omega}{\omega_1} \cos \frac{\Gamma}{2} t + \frac{(\omega - \omega_1)}{\Gamma \omega_1} \left[ 2\Gamma \cos \frac{\Gamma}{2} t - 2i\omega \sin \frac{\Gamma}{2} t \right] \right\} \exp \left( i \frac{\omega}{2} t \right). \quad (4.3.43)$$

Após agrupar os termos de cossenos e senos e um leve trabalho geométrico, temos

$$b(t) = \sin \frac{\alpha}{2} \left[ \cos \frac{\Gamma}{2} t - i \frac{(\omega_1 + \omega)}{\Gamma} \sin \frac{\Gamma}{2} t \right] \exp \left( i \frac{\omega}{2} t \right), \quad (4.3.44)$$

o que permite escrever finalmente a solução exata (4.3.19) da equação de Schrödinger dependente do tempo

$$|\chi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} \left[ \cos \frac{\Gamma}{2} t + i \frac{(\omega - \omega_1)}{\Gamma} \sin \frac{\Gamma}{2} t \right] \exp \left( -i \frac{\omega}{2} t \right) \\ \sin \frac{\alpha}{2} \left[ \cos \frac{\Gamma}{2} t - i \frac{(\omega_1 + \omega)}{\Gamma} \sin \frac{\Gamma}{2} t \right] \exp \left( i \frac{\omega}{2} t \right) \end{pmatrix}. \quad (4.3.45)$$

Observe que o spinor  $|\chi(t)\rangle$  já está normalizado, o que é consequência da condição inicial (4.3.32).

É interessante neste momento escrever  $|\chi(t)\rangle$  como uma combinação linear dos autoestados instantâneos. Isso é realizado com o uso da relação de completudeza

$$\mathbb{I} = \sum_{i=\pm} |\chi_i(t)\rangle \langle \chi_i(t)|, \quad (4.3.46)$$

onde  $|\chi_i(t)\rangle$  são os autoestados instantâneos.

Em consequência da anterior, o spinor  $|\chi(t)\rangle$ , assim como qualquer outro spinor de duas componentes, satisfaz

$$|\chi(t)\rangle = \sum_{i=\pm} |\chi_i(t)\rangle \langle \chi_i(t)|\chi(t)\rangle = \left( \langle \chi_+(t)|\chi(t)\rangle \right) |\chi_+(t)\rangle + \left( \langle \chi_-(t)|\chi(t)\rangle \right) |\chi_-(t)\rangle, \quad (4.3.47)$$

que requer o cálculo dos coeficientes  $\langle \chi_{\pm}(t)|\chi(t)\rangle$ . A projeção do spinor  $|\chi(t)\rangle$  na direção

$|\chi_+(t)\rangle$  é

$$\langle \chi_+(t) | \chi(t) \rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} & \sin \frac{\alpha}{2} e^{-i\omega t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}, \quad (4.3.48)$$

que equivale a

$$\begin{aligned} \langle \chi_+(t) | \chi(t) \rangle = \cos^2 \frac{\alpha}{2} \left[ \cos \frac{\Gamma}{2} t + i \frac{(\omega - \omega_1)}{\Gamma} \sin \frac{\Gamma}{2} t \right] \exp \left( -i \frac{\omega}{2} t \right) \\ + \sin^2 \frac{\alpha}{2} \left[ \cos \frac{\Gamma}{2} t - i \frac{(\omega_1 + \omega)}{\Gamma} \sin \frac{\Gamma}{2} t \right] \exp \left( i \frac{\omega}{2} t \right), \end{aligned} \quad (4.3.49)$$

que pode ser reescrita como

$$\langle \chi_+(t) | \chi(t) \rangle = \left\{ \cos \frac{\Gamma}{2} t + i \frac{\sin \frac{\Gamma}{2} t}{\Gamma} \left[ \omega \left( \cos^2 \frac{\alpha}{2} - \sin^2 \frac{\alpha}{2} \right) - \omega_1 \right] \right\} \exp \left( -i \frac{\omega}{2} t \right), \quad (4.3.50)$$

ou ainda como

$$\langle \chi_+(t) | \chi(t) \rangle = \left[ \cos \frac{\Gamma}{2} t + i \frac{(\omega \cos \alpha - \omega_1)}{\Gamma} \sin \frac{\Gamma}{2} t \right] \exp \left( -i \frac{\omega}{2} t \right). \quad (4.3.51)$$

O coeficiente  $\langle \chi_-(t) | \chi(t) \rangle$  é calculado de maneira semelhante

$$\begin{aligned} \langle \chi_-(t) | \chi(t) \rangle = -\sin \frac{\alpha}{2} \exp(i\omega t) \cos \frac{\alpha}{2} \left[ \cos \frac{\Gamma}{2} t + i \frac{(\omega - \omega_1)}{\Gamma} \sin \frac{\Gamma}{2} t \right] \exp \left( -i \frac{\omega}{2} t \right) \\ + \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} \left[ \cos \frac{\Gamma}{2} t - i \frac{(\omega + \omega_1)}{\Gamma} \sin \frac{\Gamma}{2} t \right] \exp \left( i \frac{\omega}{2} t \right), \end{aligned} \quad (4.3.52)$$

que equivale a

$$\langle \chi_-(t) | \chi(t) \rangle = -2i \frac{\omega}{\Gamma} \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} \sin \frac{\Gamma}{2} t \exp \left( i \frac{\omega}{2} t \right) = -i \frac{\omega}{\Gamma} \sin \alpha \sin \frac{\Gamma}{2} t \exp \left( i \frac{\omega}{2} t \right). \quad (4.3.53)$$

Isso permite escrever o spinor  $|\chi(t)\rangle$  como

$$|\chi(t)\rangle = \left[ \cos \frac{\Gamma}{2}t + i \frac{(\omega \cos \alpha - \omega_1)}{\Gamma} \sin \frac{\Gamma}{2}t \right] \exp \left( -i \frac{\omega}{2}t \right) |\chi_+(t)\rangle - i \frac{\omega}{\Gamma} \sin \alpha \sin \frac{\Gamma}{2}t \exp \left( i \frac{\omega}{2}t \right) |\chi_-(t)\rangle . \quad (4.3.54)$$

Agora que o problema foi resolvido completamente, é possível discutir o regime adiabático e a fase de Berry.

### 4.3.1 O regime adiabático e a fase de Berry

É interessante analisar o regime adiabático deste sistema. Para tanto, é preciso "traduzir", em termos de características do sistema, a hipótese adiabática.

A hipótese adiabática consiste, antes de tudo, em determinar a relação entre a velocidade de evolução do sistema e a taxa de alteração do hamiltoniano. Para os casos em que o hamiltoniano se altera muito lentamente com respeito à evolução interna do sistema, vale a hipótese adiabática. Isso permite identificar a frequência de precessão  $\omega$  do campo magnético  $\mathbf{B}$  com a taxa de alteração do hamiltoniano. Por outro lado, sabe-se que o spin precessa em torno de  $\mathbf{B}$  com a frequência de Larmor  $\omega_1$ , o que permite a identificação de  $\omega_1$  com a velocidade de evolução interna do sistema. Dessa forma, fica claro que, quando  $\omega \ll \omega_1$ , o teorema adiabático deve valer.

Uma hipótese utilizada foi a de que o sistema começa no autoestado  $|\chi_+(0)\rangle$ . Sob a luz do teorema adiabático, é de se esperar que com o passar do tempo, o sistema permaneça no autoestado  $|\chi_+(t)\rangle$ . Para verificar essa afirmação, devemos calcular a probabilidade de transição do spinor  $|\chi(t)\rangle$  para o autoestado  $|\chi_-(t)\rangle$ , isto é,  $|\langle \chi(t) | \chi_-(t) \rangle|^2$ .

Esse cálculo já foi feito, basta tomar o módulo quadrático da (4.3.53), o que fornece

$$|\langle \chi(t) | \chi_-(t) \rangle|^2 = \left| \frac{\omega}{\gamma} \sin \alpha \sin \frac{\Gamma}{2}t \right|^2 , \quad (4.3.55)$$

onde  $\Gamma = \sqrt{\omega^2 + \omega_1^2 - 2\omega\omega_1 \cos \alpha}$ .

No regime adiabático,  $\Gamma$  é aproximadamente igual a  $\omega_1$ , de modo que

$$|\langle \chi(t) | \chi_-(t) \rangle|^2 \approx \left| \frac{\omega}{\omega_1} \sin \alpha \sin \frac{\Gamma}{2} t \right|^2, \quad (4.3.56)$$

ou seja, a probabilidade de transmissão é quadrática em  $\frac{\omega}{\omega_1}$ , ou seja, pode ser desprezada no limite  $\frac{\omega}{\omega_1} \rightarrow 0$ . Dessa forma, é possível afirmar que, ao longo do tempo, no regime adiabático, o spinor  $|\chi(t)\rangle$  assume a forma

$$|\chi(t)\rangle = \left[ \cos \frac{\Gamma}{2} t + i \frac{(\omega \cos \alpha - \omega_1)}{\Gamma} \sin \frac{\Gamma}{2} t \right] \exp \left( -i \frac{\omega}{2} t \right) |\chi_+(t)\rangle, \quad (4.3.57)$$

o que está inteiramente de acordo com o teorema adiabático, porque o spinor permanece no autoestado  $|\chi_+(t)\rangle$ , isto é, a probabilidade de transição para o outro autoestado é desprezível.

No que diz respeito à fase de Berry, todas as exigências são satisfeitas para calculá-la, a saber: o regime adiabático é bem estabelecido e o hamiltoniano, após uma precessão completa de  $\mathbf{B}$ , retorna à sua forma inicial em  $t = T = \frac{2\pi}{\omega}$ . Há mais de uma maneira de calcular a fase de Berry para esse caso, a mais geral delas é mostrada na seção (4.5). No cenário presente, contudo, convém ilustrar um método alternativo.

Da discussão inicial sobre a fase de Berry, vide a (4.1.4), sabemos que é possível escrever o spinor  $|\chi(t)\rangle$  como

$$|\chi(t)\rangle = e^{i\gamma_+(t)} e^{i\theta_+(t)} |\chi_+(t)\rangle, \quad (4.3.58)$$

onde  $\theta_+(t)$  é a fase dinâmica, cuja origem está relacionada à evolução temporal do spinor  $|\chi(t)\rangle$ , e  $\gamma_+(t)$  corresponde à fase geométrica adquirida após um tempo  $t$ . Do estudo da evolução temporal, sabe-se que  $\theta_+(t)$  vale

$$\theta(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_+(t') dt'. \quad (4.3.59)$$

Observe que, depois de um ciclo,  $t = T$  e  $|\chi_+(T)\rangle = |\chi_+(0)\rangle$ , ou seja, de acordo com a (4.3.57)

$$|\chi(T)\rangle = e^{i\gamma_+(T)} e^{i\theta_+(T)} |\chi_+(T)\rangle = e^{i\gamma_+(T)} e^{i\theta_+(T)} |\chi_+(0)\rangle = e^{i\gamma_+(T)} e^{i\theta_+(T)} |\chi(0)\rangle . \quad (4.3.60)$$

É fácil ver que, caso consigamos calcular a fase total adquirida durante o ciclo,  $\Phi_{total}$ , e soubermos qual parte é fase dinâmica, a fase de Berry será dada pela diferença  $\gamma_+(T) = \Phi_{total}(T) - \theta_+(T)$ . Antes de calcular esses termos, é preciso aplicar a hipótese adiabática à expressão (4.3.57). Sob essa condição

$$\Gamma = \omega_1 \sqrt{1 - 2\frac{\omega}{\omega_1} \cos \alpha + \frac{\omega^2}{\omega_1^2}} \approx \omega_1 \left(1 - \frac{\omega}{\omega_1} \cos \alpha\right) = \omega_1 - \omega \cos \alpha , \quad (4.3.61)$$

o que permite então escrever o spinor  $|\chi(t)\rangle$ , dado pela (4.3.57), como

$$|\chi(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{\omega_1}{2}t\right) \exp\left(i\frac{\omega \cos \alpha}{2}t\right) \exp\left(-i\frac{\omega}{2}t\right) |\chi_+(t)\rangle , \quad (4.3.62)$$

que, calculado em  $t = T = \frac{2\pi}{\omega}$ , fornece

$$|\chi(T)\rangle = \exp\left(-i\frac{\omega_1}{\omega}\pi\right) \exp\left(-i(1 - \cos \alpha)\pi\right) |\chi_+(t)\rangle , \quad (4.3.63)$$

onde se identifica claramente

$$\Phi_{total} = -\frac{\omega_1}{\omega}\pi - i(1 - \cos \alpha)\pi . \quad (4.3.64)$$

Por outro lado, podemos calcular a fase dinâmica  $\theta_+(T)$

$$\theta_+(T) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T \left(\frac{\hbar\omega_1}{2}\right) dt' = -\frac{\omega_1}{\omega}\pi , \quad (4.3.65)$$

o que implica em

$$\gamma(T) = \Phi_{total}(T) - \theta_+(T) = -(1 - \cos \alpha)\pi , \quad (4.3.66)$$

que corresponde à fase de Berry adquirida no processo.

Observe que o termo  $(1 - \cos \alpha)\pi$  corresponde a metade do ângulo sólido  $\Omega$  descrito pelo campo magnético  $\mathbf{B}$  em precessão, vide fig. 4.3. Verifiquemos essa afirmação, a partir da definição de ângulo sólido, que, para o presente problema é

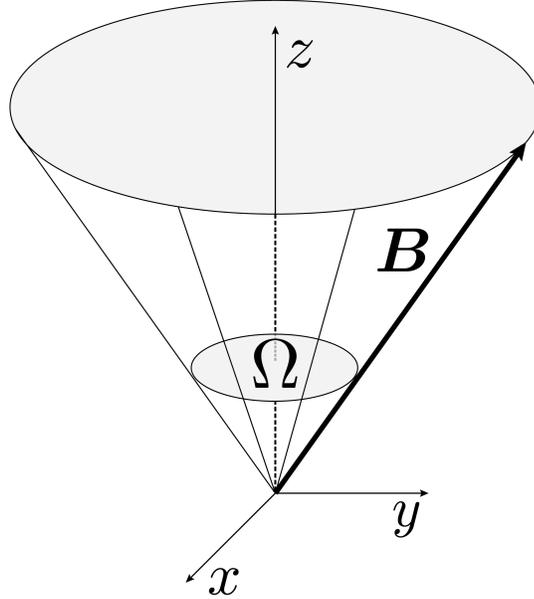


Figura 4.3: Ângulo sólido  $\Omega$  descrito pela precessão do campo magnético  $\mathbf{B}$ .

$$\Omega = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\alpha \sin \theta d\theta = 2(1 - \cos \alpha)\pi \quad (4.3.67)$$

Esse procedimento é condizente com a metodologia experimental, uma vez que, em geral, o que se mede é a fase total  $\Phi_{total}$ . Dessa forma, uma vez sabida a parcela devida à evolução temporal,  $\theta_+(T)$ , é possível extrair a fase geométrica  $\gamma_+(T)$ .

Observe, por outro lado, que  $\gamma_+(T)$  vem imediatamente da integração da (4.1.8) no tempo, a saber

$$\gamma_n(t) = i \int \langle n(\mathbf{R}(t)) | \nabla_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}(t)) \rangle d\mathbf{R}(t) = i \int \langle n(\mathbf{R}(t)) | \frac{d}{dt'} n(\mathbf{R}(t)) \rangle dt' \quad (4.3.68)$$

A (4.3.68) permite escrever

$$\gamma_+(T) = i \int_0^T \langle \chi_+(t') | \frac{d}{dt'} | \chi_+(t') \rangle dt' , \quad (4.3.69)$$

que é igual a

$$\gamma_+(T) = i \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} & e^{-i\omega t} \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ i\omega e^{i\omega t} \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} dt' = -(1 - \cos \alpha)\pi , \quad (4.3.70)$$

que está de acordo com o cálculo prévio.

## 4.4 Fase geométrica para uma partícula com spin: o caso geral

Consideremos uma partícula de *spin*  $S$  sob a ação de um campo magnético  $\mathbf{B}$  de módulo constante e direção *muito lentamente* variável. O hamiltoniano da interação é

$$H(\mathbf{B}(t)) = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\frac{g\mu}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(t) , \quad (4.4.1)$$

onde  $g$  é a *razão giromagnética da partícula*,  $\mu$  é o momento dipolo magnético e  $\mathbf{S}$  é o operador spin.

As autoenergias são dadas por

$$E_m = -g\mu mB , \quad (4.4.2)$$

onde  $m$  é em geral semi inteiro e limitado inferior e superiormente por  $-S$  e  $+S$ <sup>13</sup>, respectivamente.

---

<sup>13</sup> $S$ , que é inteiro (ou semi inteiro) e positivo, é o número quântico relacionado aos autovalores da *magnitude* do spin;  $m$  está relacionado com a componente do spin na direção  $z'$ .

A cada instante o campo magnético aponta em uma direção levemente diferente, o que nos permite definir um eixo  $z'(t)$  que aponta na direção de  $\mathbf{B}$  para cada  $t$  (definimos também os eixos  $x'(t)$  e  $y'(t)$ ). A partir da (4.4.1), é evidente que devemos tomar  $\mathbf{B}(t)$  como o parâmetro  $\mathbf{R}(t)$ . Além disso, uma vez que o campo magnético apenas muda de direção, os caminhos e superfícies de integração das (4.1.14) e (4.1.15) devem estar contidos na superfície esférica que contém  $\mathbf{B}(t)$  no espaço dos parâmetros, como ilustrado na fig. 4.2.

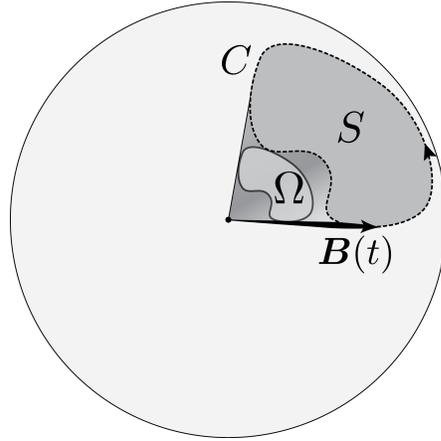


Figura 4.4: Caminho percorrido pela extremidade do vetor  $\mathbf{B}$  no espaço dos parâmetros.

Observemos que apenas no centro daquela esfera, obviamente inacessível a qualquer caminho na superfície, as autoenergias são degeneradas, de modo que a (4.1.23) pode ser usada sem cautelas adicionais.

Para calcular  $V_n(\mathbf{B})$ , observamos que

$$\nabla_{\mathbf{B}} H(\mathbf{B}) = -\frac{g\mu}{\hbar} \mathbf{S}, \quad (4.4.3)$$

que permite escrever

$$\mathbf{V}_m(\mathbf{B}) = \text{Im} \left\{ \sum_{m \neq m'} \frac{\langle m(\mathbf{B}) | \mathbf{S} | m'(\mathbf{B}) \rangle \times \langle m'(\mathbf{B}) | \mathbf{S} | m(\mathbf{B}) \rangle}{\hbar^2 B^2 (m - m')^2} \right\}, \quad (4.4.4)$$

onde foi feito  $n \rightarrow m$  e  $m \rightarrow m'$ .

Observações muito importantes devem ser feitas para simplificar a (4.4.4). A primeira

delas é observar que  $\mathbf{S} = \mathbf{S}_{x'} + \mathbf{S}_{y'} + \mathbf{S}_{z'}$ ; a segunda é notar que os dois termos do numerador da (4.4.4) são elementos de matriz do operador  $\mathbf{S}$  escritos na base que diagonaliza  $S_{z'}$ . É necessário, portanto, escrever as representações matriciais dos operadores  $S_{x'}$ ,  $S_{y'}$  e  $S_{z'}$ <sup>14</sup>.

O operador  $S_{z'}$  já está diagonalizado e sua base é usada na representação dos operadores  $S_{x'}$  e  $S_{y'}$ , que não são diagonais com respeito àquela base. Os operadores  $S_{x'}$  e  $S_{y'}$  têm todos seus elementos *nulos*, exceto *apenas* os elementos imediatamente acima e imediatamente abaixo da diagonal principal ( $m' = m \pm 1$ ). Isso é representado por

$$[S_{z'}]_{mn} = \hbar m \delta_{m,m'} , \quad (4.4.5)$$

$$\langle m \pm 1(\mathbf{B}) | S_{x'} | m(\mathbf{B}) \rangle = \hbar \sqrt{(S \mp m)(S \pm m + 1)} , \quad (4.4.6)$$

e

$$\langle m \pm 1(\mathbf{B}) | S_{y'} | m(\mathbf{B}) \rangle = \mp i \hbar \sqrt{(S \mp m)(S \pm m + 1)} , \quad (4.4.7)$$

onde  $S$  é o mesmo para todos os kets, visto que a magnitude do spin é fixa.

Para  $m' = m + 1$ , as (4.4.6) e (4.4.7) fornecem

$$\langle m(\mathbf{B}) | \mathbf{S} | m + 1(\mathbf{B}) \rangle \times \langle m + 1(\mathbf{B}) | \mathbf{S} | m(\mathbf{B}) \rangle = -i \frac{\hbar^2}{2} (S - m)(S + m + 1) \hat{\mathbf{z}}' , \quad (4.4.8)$$

enquanto para  $m' = m - 1$  temos

$$\langle m(\mathbf{B}) | \mathbf{S} | m - 1(\mathbf{B}) \rangle \times \langle m - 1(\mathbf{B}) | \mathbf{S} | m(\mathbf{B}) \rangle = i \frac{\hbar^2}{2} (S + m)(S - m + 1) \hat{\mathbf{z}}' . \quad (4.4.9)$$

Sob a luz da (4.4.8) e da (4.4.9), a (4.4.4) passa a valer

$$\mathbf{V}_m(\mathbf{B}) = \frac{m}{B^2} \hat{\mathbf{z}}' , \quad (4.4.10)$$

---

<sup>14</sup> $S_z$  é trivial, enquanto o cálculo de  $S_{x',y'}$  é realizado a partir dos *ladder operators*, também chamados de *operadores criação e aniquilação*.

onde  $\hat{\mathbf{z}}' \equiv \hat{\mathbf{B}}$  é o versor que indica a direção do campo  $\mathbf{B}$  a cada instante.

Com a 4.4.10, é simples calcular a fase de Berry adquirida pelo *ket* da partícula caso o campo magnético descreva um ciclo

$$\gamma_m(C) = - \int_{S(C)} \mathbf{V}_m(\mathbf{B}) \cdot d\mathbf{S} = -m \int_{S(C)} \frac{\hat{\mathbf{B}}}{B^2} \cdot d\mathbf{S} , \quad (4.4.11)$$

onde identificamos o termo

$$\int_{S(C)} \frac{\hat{\mathbf{B}}}{B^2} \cdot d\mathbf{S} \quad (4.4.12)$$

com o ângulo sólido  $\Omega(C)$  compreendido por  $C$  no espaço dos parâmetros, de modo que

$$\gamma_m(C) = -m\Omega(C) . \quad (4.4.13)$$

Observe que a fase adquirida independe da magnitude do campo magnético e do valor de  $S$ ; a dependência é apenas no número quântico  $m$  e do caminho  $C$ , percorrido pela extremidade de  $\mathbf{B}$  no espaço dos parâmetros. No efeito Aharonov-Bohm a dependência é ainda mais simples: basta que a trajetória da partícula envolva o solenóide<sup>15</sup> - a fase nem sequer depende do estado  $n$ . A demonstração feita vale tanto para férmions quanto para bósons, bem como para o caso em que  $\mathbf{B}$  precessa em torno de um eixo fixo (seção 4.3). A verificação experimental foi feita a partir da polarização de nêutrons por T. Bitter e D. Dubbers em 1987<sup>16</sup>.

É notável a semelhança desse exemplo com o análogo clássico, exposto no início do capítulo. Isso sugere que as fases geométricas surgem em fenômenos tanto clássico quanto quânticos - o que é de fato o caso. Um exemplo disso é a mudança do plano de polarização da luz (descrita pela mecânica quântica relativística) ao atravessar uma fibra ótica torcida. A

---

<sup>15</sup>Naquele caso, a variável  $\mathbf{R}(t)$  é tomada como a posição da caixa que confina a partícula ao longo do trajeto.

<sup>16</sup>Bem como os elétrons, nêutrons têm spin e, portanto, podem ser polarizados. No experimento em questão, a fase geométrica e a fase dinâmica são responsáveis por alterar a polarização dos nêutrons. Esse processo altera os valores esperados do spin dos nêutrons, o que permite a verificação experimental. As medidas estão em acordo bastante aceitável com a teoria.

mudança no plano de polarização é corretamente descrita tanto em termos da fase de Berry quanto em termos do ângulo de Hannay<sup>17</sup>.

---

<sup>17</sup>A confirmação experimental dessa equivalência foi feita por Chiao, Wu e Tomita em 1986.

# Conclusões

O efeito Aharonov-Bohm foi primeiramente apresentado em um cenário sem restrições a nenhuma coordenada, de modo que a energia mostrou-se independente do fluxo do campo magnético. Viu-se que, caso a coordenada radial da função de onda fosse fixada,  $\rho = R$ , a energia seria quantizada e dependente do fluxo do campo magnético pelo solenóide. Esses aspectos são consequência direta do potencial vetor fazer parte da equação de Schrödinger.

No capítulo sobre o teorema adiabático uma digressão foi feita sobre teoria de perturbação dependente do tempo. Os resultados obtidos foram então usados para demonstrar de maneira grosseira o teorema adiabático, que é peça fundamental na prova da fase de Berry. A partir disso, a fase de Berry foi demonstrada e o efeito Aharonov-Bohm foi revisitado. Uma outra aplicação foi feita para o caso da fase adquirida por uma partícula com spin em uma região com campo magnético. Algumas observações acerca da relação entre as propriedades do espaço dos parâmetros e os efeitos de fase foram feitas.

# Apêndice A

## Sobre o potencial generalizado e a força de Lorentz

É necessário mostrar que o potencial

$$U(\mathbf{r}, t) = q \left[ \phi(\mathbf{r}, t) - \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right] \quad (\text{A.0.1})$$

reproduz a força de Lorentz.

A componente de força generalizada  $F_j$  é dada pela equação que abre a seção 1.5 do Goldstein (referência [1])

$$F_j = -\frac{\partial U}{\partial q_j} + \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_j} \right). \quad (\text{A.0.2})$$

Escolhendo as coordenadas cartesianas como os  $q_j$ , obtém-se a componente  $x$  da força generalizada

$$F_x = q \left( -\frac{\partial \phi}{\partial x} + \dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial A_y}{\partial x} + \dot{z} \frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{dA_x}{dt} \right). \quad (\text{A.0.3})$$

O último termo entre os parênteses da (A.0.3) vale

$$\frac{dA_x}{dt} = \dot{x} \frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y} \frac{\partial A_x}{\partial y} + \dot{z} \frac{\partial A_x}{\partial z} + \frac{\partial A_x}{\partial t}. \quad (\text{A.0.4})$$

Inserindo a (A.0.4) na (A.0.3) e agrupando os termos relativos às velocidades, obtemos

$$F_x = q \left[ -\frac{\partial\phi}{dx} - \frac{\partial A_x}{dt} + \dot{y} \left( \frac{\partial A_y}{dx} - \frac{\partial A_x}{dy} \right) - \dot{z} \left( \frac{\partial A_x}{dz} - \frac{\partial A_z}{dx} \right) \right]. \quad (\text{A.0.5})$$

Examinemos os resultados paralelos

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = \left( \frac{\partial A_z}{dy} - \frac{\partial A_y}{dz} \right) \vec{i} + \left( \frac{\partial A_x}{dz} - \frac{\partial A_z}{dx} \right) \vec{j} + \left( \frac{\partial A_y}{dx} - \frac{\partial A_x}{dy} \right) \vec{k} \quad (\text{A.0.6})$$

e

$$\mathbf{v} \times \mathbf{B} = (\dot{y}B_z - \dot{z}B_y) \vec{i} + (\dot{z}B_x - \dot{x}B_z) \vec{j} + (\dot{x}B_y - \dot{y}B_x) \vec{k}. \quad (\text{A.0.7})$$

Note que os últimos dois termos de  $F_x$  na (A.0.5) correspondem à componente  $x$  do produto  $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ . Dessa forma, podemos escrever

$$F_x = q \left[ -\frac{\partial\phi}{dx} - \frac{\partial A_x}{dt} + (\mathbf{v} \times \mathbf{B})_x \right] \quad (\text{A.0.8})$$

A forma de  $U$  permite afirmar que resultados inteiramente análogos valem para as componentes  $F_y$  e  $F_z$ . Esse resultado pode ser expresso na forma vetorial como

$$\mathbf{F} = q \left( -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{dt} + \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right), \quad (\text{A.0.9})$$

que é a força de Lorentz.

## Apêndice B

# Sobre a invariância de gauge da equação de Schrödinger

O objetivo é mostrar a (1.3.9)

$$H'\Phi = \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right)H\psi = E\Phi, \quad (\text{B.0.1})$$

na qual

$$\Phi(\mathbf{r}) = \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) \quad (\text{B.0.2})$$

e  $\psi(\mathbf{r})$  é solução da equação de Schrodinger independente do tempo para os potenciais não transformados  $\phi$  e  $\mathbf{A}$ . Apliquemos o hamiltoniano modificado  $H'$  sobre a função  $\Phi$

$$H'\Phi = \left\{ \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla \cdot -q\mathbf{A} - q\nabla\Gamma)(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A} - q\nabla\Gamma) + q\phi \right\} \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) \quad (\text{B.0.3})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla \cdot -q\mathbf{A} - q\nabla\Gamma) \left\{ -i\hbar\nabla \left[ \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right)\psi \right] \right. \\ &\quad \left. - q \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right)\psi\mathbf{A} - q \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right)\psi\nabla\Gamma \right\} + \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right)q\phi\psi \quad (\text{B.0.4}) \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla \cdot -q\mathbf{A} - q\nabla\Gamma) \left[ \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right) \left( -i\hbar\nabla\psi - q\psi\mathbf{A} \right) + \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right) q\phi\psi \right] \quad (\text{B.0.5})$$

nas quais se usou a regra da cadeia e a identidade  $\nabla(fg) = f\nabla g + g\nabla f$ . O próximo passo é calcular

$$= \frac{1}{2m} \left\{ -i\hbar\nabla \cdot \left[ \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right) \left( -i\hbar\nabla\psi - q\psi\mathbf{A} \right) \right] + i\frac{q}{\hbar} \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right) (\mathbf{A} + \nabla\Gamma)(i\hbar\nabla\psi + q\psi\mathbf{A}) \right\} + \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right) q\phi\psi, \quad (\text{B.0.6})$$

o que é feito a partir da identidade  $\nabla \cdot (fg) = \nabla f \cdot \mathbf{g} + f\nabla \cdot \mathbf{g}$  e da regra da cadeia. Isso fornece

$$= \frac{1}{2m} \left\{ -i\hbar \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right) \left[ -i\hbar\nabla^2\psi - q\psi\nabla \cdot \mathbf{A} + q\mathbf{A} \cdot \nabla\psi + i\frac{q}{\hbar} \left( -i\hbar\nabla\Gamma \cdot \nabla\psi - q\psi\mathbf{A} \cdot \nabla\Gamma \right) \right] + q \left( i\hbar\mathbf{A}\nabla\psi + q\psi\mathbf{A}^2 + i\hbar\nabla\Gamma \cdot \nabla\psi + q\psi\mathbf{A} \cdot \nabla\Gamma \right) \right\} + \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right) q\phi\psi, \quad (\text{B.0.7})$$

que, após os devidos cancelamentos, gera

$$= \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right) \left\{ \frac{1}{2m} \left[ -\hbar^2\nabla^2\psi + i\hbar q\psi\nabla \cdot \mathbf{A} + i\hbar q\mathbf{A} \cdot \nabla\psi + i\hbar q\mathbf{A}\nabla\psi + q^2\psi\mathbf{A}^2 \right] + q\phi\psi \right\}, \quad (\text{B.0.8})$$

ou

$$= \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right) \left\{ \frac{1}{2m} \left[ -\hbar^2\nabla^2 + i\hbar q\nabla \cdot \mathbf{A} + 2i\hbar q\mathbf{A} \cdot \nabla + q^2\mathbf{A}^2 \right] + q\phi \right\} \psi, \quad (\text{B.0.9})$$

que equivale a

$$H'\Phi = \exp\left(i\frac{q}{\hbar}\Gamma\right) H\psi = E\Phi. \quad (\text{B.0.10})$$

Isso prova a (1.3.9).

# Referências Bibliográficas

- [1] Goldstein, H., Poole, C., Safko, J., *Classical Mechanics*. Addison Wesley, Massachusetts, 3rd Edition, 2001.
- [2] Taylor, J. R., *Classical Mechanics*. University Science Books, 1st Edition, 2005.
- [3] Aharonov, Y., Bohm, D. *Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory*. Proc. Phys. Soc. B, Vol. 62, Number 1, 1949.
- [4] Ehrenberg, W., Siday, R. E. *The refractive Index in Electron Optics and the Principles of Dynamics*. Phys. Rev., 115, 485-491 p., 1959.
- [5] Berry, M. V., *Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes*. Proc. Phys. Soc. A, Vol. 392, 45-57 p. 1984.
- [6] Chambers, R. G., *Shift of an Electron Interference Pattern by Enclosed Magnetic Flux*. Phys. Rev. Lett., 5, 3-5 p. 1960.
- [7] Bitter, T., Dubbers, D., *Manifestation of Berry's topological phase in neutron spin rotation*. Phys. Rev. Lett., 59, 251-254 p. 1987.
- [8] Colella, A., Overhauser, A., Werner, S.A. *Observation of the Phase Shift of a Neutron Due to Precession in a Magnetic Field*. Phys. Rev. Lett., 35, 1053-1055 p. 1975.
- [9] Rauch, H. *et al. Verification of coherent spinor rotation of Fermions*. Phys. Lett. A, 54, Issue 6, 425-427 p. 1975.

- [10] Sakurai, J. J., *Modern Quantum Mechanics*. Addison Wesley, Massachusetts, Revised Edition, 1994.
- [11] Griffiths, D. J., *Introduction to Quantum Mechanics*. Pearson Prentice hall, 2nd Edition, 2004.
- [12] Greiner, W., *Quantum Mechanics: An Introduction*. Springer, 4th Edition, 2001.
- [13] Kenichi, K., Paffuti, G., *Quantum Mechanics: A New Introduction*. Oxford, 1st Edition, 2009.
- [14] Hamilton, J., *Aharonov-Bohm and Other Cyclic Phenomena*. Springer, 1st Edition, 1997.