Fase de Berry

Prof. Alberto Camjayi

Introducción

Teorías de perturbaciones

En el curso de mecánica cuántica normalmente se estudian las teorías de perturbaciones independiente del tiempo y dependiente del tiempo para potenciales “débiles”.

Que el potencial sea pequeño no es el único caso que puede tratarse. Existen otros.

Aquí desarrollaremos la teoría de perturbaciones suponiendo que la dependencia temporal es “lenta”.

Aproximación adiabática

Hamiltoniano dependiente del tiempo

Supongamos que el hamiltoniano depende del tiempo a través de cierto parámetro o parámetros $\mathbf{R}(t)$:

$$\hat{H} = \hat{H}(\mathbf{R}(t)).$$

Sus autoestados evolucionan siguiendo la ecuación de Schrödringer

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = \hat{H}(\mathbf{R}(t))|\psi(t)\rangle$$

Aproximación adiabática

Hamiltoniano dependiente del tiempo

Si bien el hamiltoniano depende del tiempo, en cada instante, puede definirse una ecuación de “independiente del tiempo”. Los ***autoestados instantáneos*** cumplen

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

con $E_n(\mathbf{R})$ las autoenergías instantáneas.

Intuitivamente, parece posible que si los parámetros varían lo suficientemente lento y el sistema se prepara en el estado inicial $|n(\mathbf{R}(0))\rangle$, el estado dependiente del tiempo será $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$ más allá de una fase.

Aproximación adiabática

Autofunciones instantáneas

Para avanzar con la idea, usemos la base instantánea para escribir una solución general de la ecuación de Schrödinger

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{i\alpha(t)} |n(\mathbf{R}(t))\rangle,$$

donde la *“fase dinámica”* es la generalización de la fase que aparece en el caso independiente del tiempo:

$$\alpha(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(\mathbf{R}(t'))\mathrm{d}t'.$$

Aproximación adiabática

Ecuación de Schrödringer

Reemplazando esta expansión en la ecuación de Schrödinger, se obtiene

$$\sum_n \dot{a}_n(t) e^{i\alpha_n(t)} |n(t)\rangle + \sum_n a_n(t) e^{i\alpha_n(t)} |\dot{n}(t)\rangle = 0$$

Si tomamos el producto interno con un bra genérico de la misma base $\langle m| = \langle m(\mathbf{R}(t))|$ se obtiene

$$\dot{a}_m(t) = -\sum_n a_n(t) e^{i(\alpha_n(t)-\alpha_m(t))} \langle m(t)|\dot{n}(t)\rangle$$

Aproximación adiabática

Ecuación de Schrödringer

Para calcular el bra-ket, derivemos respecto del tiempo la ecuación instantánea

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

para obtener

$$\dot{\hat{H}}|n\rangle + \hat{H}|\dot{n}\rangle = \dot{E}_n|n\rangle + E_n|\dot{n}\rangle.$$

Proyectando sobre $m \neq n$:

$$\langle m|\dot{\hat{H}}|n\rangle = (E_n - E_m)\langle m|\dot{n}\rangle.$$

obtenemos una expresión que podemos reemplazar en la ecuación de los coeficientes.

Aproximación adiabática

Ecuación de los coeficientes

Reemplazando el bra-ket (solo para $m \neq n$):

$$\dot{a}_m(t) = -a_m(t)\langle m(t)|\dot{m}(t)\rangle$$

$$-\sum_{n \neq m} a_n(t) e^{i(\alpha_n(t)-\alpha_m(t))} \frac{\langle m(t)|\dot{\hat{H}}|n(t)\rangle}{E_m - E_n}$$

Esta es la solución formal del problema dependiente del tiempo. El segundo término a la derecha del igual nos muestra que, a medida que avanza el tiempo, estados con $m \neq n$ se mezclan con $|n(t)\rangle$ debido a la dependencia temporal del hamiltoniano.

Aproximación adiabática

Aproximación adiabática

La aproximación adiabática consiste en despreciar el segundo término frente al primero. Esto esta justificado si

$$\frac{\langle m(t)|\dot{\hat{H}}|n(t)\rangle}{E_m - E_n} \equiv \frac{1}{\tau} \ll \langle m|\dot{m}\rangle \sim \frac{E_m}{\hbar}.$$

El tiempo característico de cambios en el hamiltoniano, τ, tiene que ser mucho mayor que la inversa de la frecuencia natural del autoestado.

Aproximación adiabática

Aproximación adiabática

La aproximación adiabática consiste en despreciar el segundo término frente al primero. En este caso, la ecuación es

$$\dot{a}_n(t) = -a_n(t)\langle n(t)|\dot{n}(t)\rangle \implies a_n(t) = a_n(0)e^{i\gamma_n(t)}$$

donde

$$\gamma_n(t) = i\int_0^t \langle n(t')|\dot{n}(t')\rangle \mathrm{d}t' \in \mathbb{R}.$$

Por lo tanto, en la aproximación adiabática, si el sistema esta inicialmente en un autoestado instantáneo $|n(0)\rangle$, permanecerá en el estado $|n(t)\rangle$ ya que $a_n(0) = 1$ y $a_m(0) = 0, \forall m \neq n$.

Fase de Berry

Estado en la aproximación adiabática

En la aproximación adiabática, si el estado inicial es un autoestado instantáneo, la función de onda se escribe como

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{i\alpha(t)} e^{i\gamma_n(t)} |n(\mathbf{R}(t))\rangle.$$

Como las fases se suman en una fase global y el autoestado instantáneo esta definido a menos de una fase, por cierto tiempo se creyó que las mismas no eran importantes.
Sin embargo, en 1984, M. V. Berry publicó un trabajo donde analizaba que sucedería con la fase si los parámetros se variasen en un camino cerrado. La fase acumulada, que Berry denominó fase geométrica, se conoce habitualmente como “fase de Berry”.

Fase de Berry

Camino cerrado

Volvamos a escribir la dependencia explícita en un vector de parámetros

$$|\dot{n}(\mathbf{R}(t))\rangle = |\nabla_{\mathbf{R}} n(t)\rangle \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{R}}{\mathrm{d}t}$$

La fase de Berry será

$$\gamma_n(T) = i \int_0^T \langle n(t)|\nabla_{\mathbf{R}} n(t)\rangle \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{R}}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}t$$

$$= i \int_{\mathbf{R}(0)}^{\mathbf{R}(T)} \langle n(t)|\nabla_{\mathbf{R}} n(t)\rangle \cdot \mathrm{d}\mathbf{R}$$

En un camino cerrado

$$\mathbf{R}(T) = \mathbf{R}(0)$$

Fase de Berry

Camino cerrado

Volvamos a escribir la dependencia explícita en un vector de parámetros

$$|\dot{n}(\mathbf{R}(t))\rangle = |\nabla_{\mathbf{R}} n(t)\rangle \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{R}}{\mathrm{d}t}$$

La fase de Berry será

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

La fase depende solo del camino elegido y no de la parametrización $\mathbf{R}(t)$. Por eso también se la llama fase geométrica.

Fase de Berry

Conexión de Berry

Si se cambia la fase arbitraria del autoestado instantáneo inicial, ¿la fase de Berry cambia? ¿O es invariante (observable)? Definamos la “conexión de Berry” (la analogía electromagnética es obvia)

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i\langle n(t)|\nabla_{\mathbf{R}} n(t)\rangle,$$

En cuyo caso (usando Stokes) podemos escribir

$$\gamma_n(C) = \oint_C \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot \mathrm{d}\mathbf{R} = \int_S \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot \mathrm{d}\mathbf{a}$$

Como vemos la fase esta determinada por el “flujo” de un campo generalizado.

Fase de Berry

Fase de Berry

Hagamos un cambio en la fase del autoestado

$|n(t)\rangle \rightarrow e^{i\delta(\mathbf{R})}|n(t)\rangle.$

La conexión de Berry no es invariante

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i\langle n(t)|\nabla_{\mathbf{R}} n(t)\rangle \rightarrow \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \nabla_{\mathbf{R}}\delta(\mathbf{R})$$

Pero la fase de Berry si lo es y por lo tanto no depende del comportamiento de la fase a lo largo del camino de integración.

$$\gamma_n(C) = \int_S \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot \mathrm{d}\mathbf{a}$$

Fase de Berry

Evaluando la fase de Berry

De la identidad $\nabla \times (\phi \mathbf{D}) = \phi \nabla \times \mathbf{D} + (\nabla \phi) \times \mathbf{D}$, podemos ver que

$$\mathbf{B}_n(\mathbf{R}) = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = \nabla_{\mathbf{R}} \times i\langle n(t)|\nabla_{\mathbf{R}} n(t)\rangle$$

$$= i\langle \nabla_{\mathbf{R}} n(t)| \times |\nabla_{\mathbf{R}} n(t)\rangle$$

Introduciendo la resolución de la identidad

$$\mathbf{B}_n(\mathbf{R}) = i \sum_{m \neq n} \langle \nabla_{\mathbf{R}} n(t)|m(t)\rangle \times \langle m(t)|\nabla_{\mathbf{R}} n(t)\rangle$$

El término *n* = *m* es cero porque

$$\langle n(t)|n(t)\rangle = 1 \implies \langle \nabla_{\mathbf{R}} n(t)|n(t)\rangle = -\langle n(t)|\nabla_{\mathbf{R}} n(t)\rangle$$

Fase de Berry

Evaluando la fase de Berry

Tomando el gradiente **R** en la ecuación de Schrödringer instantánea

$$\langle m(t)|\nabla_{\mathbf{R}} n(t)\rangle = \frac{\langle m(t)|\nabla_{\mathbf{R}}\hat{H}(\mathbf{R})|n(t)\rangle}{E_n - E_m},$$

nos permite escribir

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

y

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

Fin de la clase

¡Muchas gracias!