



ESTUDO SOBRE UMA FORMULAÇÃO INVARIANTE PARA A FASE DE BERRY

19

Samuel Maier Kurcbart

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO APRESENTADA NO
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

Orientador:

Prof.Dr. Abraham Hirsz Zimmerman

São Paulo

Novembro de 1989



AGRADECIMENTOS

- Ao Professor Zimmerman pelo carinho, paciência e dedicação demonstradas durante a orientação. Sua presença se encontra, não neste ou naquele ponto em particular no trabalho, mas na forma de encarar o problema e toda a atividade científica.
- Minha profunda estima à D.H. Kobe. Nossas reuniões contribuíram fortemente para minha formação.
- Ao Prof. Valdir pelo incentivo dado, o bom humor demonstrado durante as nossas reuniões e pelos inúmeros esclarecimentos.
- Ao Ayrton Zadra, F. Pablo, P. Teotonio, A. Amorim, George, Maurício, Luís Dias, Edson e Clisthenis pelo apoio, confiança e amizade que me dedicam.
- Aos amigos do IFUSP, IME e FFCL pelo apoio e carinho.
- Ao Professor Ruben, pelos inúmeros "bate-papos" e pela sua visão profundamente humana que contribuíram fortemente para minha formação pessoal.
- A todos aqueles que conviveram e trabalharam no IFT, formando um ambiente acolhedor.
- Manifesto a minha estima aos Profs. V. Wrezinski e L.A. Ferreira por suas palavras amigas e confiantes na ciência e na arte.
- A Luzinete pelo seu trabalho paciente de datilografia, sem a qual esta dissertação não teria sido escrita.
- E ao CNPq pelo importante apoio financeiro.

RESUMO

Nesta dissertação, nosso objetivo é estender a formulação invariante por transformações unitárias da Mecânica Quântica proposta por Yang, à dedução original da fase de Berry.

A dissertação está dividida em duas partes. Na primeira, apresentaremos as formulações de Berry, Anandan-Aharonov e Kobe para a fase de Berry. Na segunda parte, estudaremos diferentes manifestações desta fase em sistemas quânticos. Uma aplicação em especial será o cálculo das fases de Berry e das probabilidades para uma partícula com spin $1/2$ na presença de um campo magnético, dependente do tempo. Nosso estudo, em concordância com a formulação de Kobe, sugere que a fase de Berry pode ser expressa de maneira invariante por transformações unitárias.

ABSTRACT

In this work we intend to extent the invariant formulation of unitary transformations in Quantum Mechanics, suggested by Yang, to the deduction of Berry's phase.

In the first part of this dissertation we shall apply the formulation due to Berry, Aharonov-Anandan and Kobe to the Berry's phase.

In the second part we shall study different manifestations of this phase in quantum systems. One special application will be the calculation of Berry's phase and probabilities for a particle of spin $1/2$ in the presence of a time magnetic field.

Our study, in accordance with Kobe's formulation, suggests that the Berry's phase can be expressed in a invariant way by unitary transformations.

ÍNDICE

Agradecimentos	
Resumo/Abstract	
Introdução	01
O fator de fase na Mecânica Quântica - A fase de Berry	07
CAPÍTULO I. O FATOR DE FASE GEOMÉTRICO NÃO-INTEGRÁVEL	
I.1 A formulação de Berry	19
I.2 A formulação de Anandan-Aharonov	26
I.3 Sistemas com autoestados degenerados	28
I.4 A formulação invariante por transformações unitárias ...	33
CAPÍTULO II. MANIFESTAÇÕES DA FASE DE BERRY	
II.1 Efeito Aharonov-Bohm	42
II.2 A aproximação Born-Oppenheimer (B.O.)	50
II.3 Verificação da fase de Berry para sistemas ópticos	62
II.4 Partícula de spin $1/2$ na presença de um campo magnético	67
II.5 A fase adiabática e a fase de Pancharatnam para a luz polarizada	72
CAPÍTULO III. EXEMPLOS ILUSTRATIVOS DO TRATAMENTO INVARIANTE PARA A FASE DE BERRY	
III.1 O Oscilador harmônico generalizado	
III.1.1 Introdução	83
1.2 A formulação Quântica	86

1.3 A formulação em que a hamiltoniana é a energia do sistema	88
1.4 A formulação Quântica	89
1.5 A fase de Berry	90
1.6 As amplitudes de probabilidade	92
1.7 A fase total	94
III.2 Partícula de spin $1/2$ na presença de um campo magnético dependente do tempo (tratamento exato)	
2.1 Introdução	97
2.2 A introdução de um referencial "girante"	99
2.3 Formulações em que a hamiltoniana é o operador energia, no referencial girante	102
2.4 A fase total	103
2.5 Probabilidade do sistema estar em um autoestado do operador energia	105
2.6 Probabilidade do sistema estar em um autoestado do SPIN	109
Conclusão	114
APENDICE 1 O Operador Potência, a Invariância de Gauge	116
APENDICE 2 A Esfera de Poincaré	127
APENDICE 3 A conexão de Berry e o Transporte Paralelo	130
Refêrências	163

Not. 1

Os capítulos são indicados por números romanos I, II, III.

As secções dos capítulos são numeradas segundo a série dos números naturais 1.1, 1.2, II.3, II.4, ...

Somente no capítulo III apresentamos subsecções. Se, porém, ocorrerem os números das equações (1.2.3) e (III.1.23), estes devem ser interpretados: (1.2.3) a equação se encontra no capítulo I, secção 2 e corresponde a expressão 3 e (III.1.23) a equação se encontra no capítulo III, secção 1, expressão 23. Em cada secção, as equações são numeradas de maneira decimal progressiva: (1), (2), ..., (21), ...

INTRODUÇÃO

Nosso objetivo nesta dissertação é analisar a reformulação da dedução original da fase de Berry. Esperamos que a formulação invariante por transformações unitárias, proposta por D.H. Kobe⁽¹⁾, nos possibilite uma visão mais clara do conteúdo físico da fase de Berry. Também nos permitirá responder a questão: "Podemos remover a fase de Berry por transformações unitárias?"

A dissertação está dividida em duas partes, que resumimos a seguir.

Na primeira parte (Capítulo I) apresentaremos a formulação da fase de Berry para a Mecânica Quântica não-relativística.

Na secção (I.1) introduziremos a dedução original da fase de Berry⁽²⁾. Esta fase foi enunciada originalmente como fase geométrica adquirida pelos autoestados de um sistema, descrito por um hamiltoniano que depende de um conjunto de parâmetros. Supõe-se que os parâmetros variam cíclica e adiabaticamente no tempo.

Na secção (I.2) estudaremos a formulação de Aharonov e Anandan⁽³⁾ para a fase de Berry. Nesta formulação, os autores reinterpretam os trabalhos originais de Berry, generalizando-os para sistemas que evoluem de forma não-adiabática. Aharonov e Anandan apresentam a fase de Berry como uma propriedade geométrica da projeção, no espaço de raios, dos ciclos percorridos pelos estados de um sistema.

Na secção (I.3) apresentaremos o tratamento de Anandan⁽⁴⁾ para sistemas descritos por hamiltonianos com espectro degenerado. Para

esses sistemas, Anandan introduz potenciais de gauge não-abelianos. Retomaremos os trabalhos de Berry⁽¹²⁾ onde ele analisa o caso de sistemas de dois níveis, no qual um ponto no espaço de parâmetros corresponde a um ponto de degenerescência para os hamiltonianos. Para estes sistemas, Berry conseguiu interpretar a fase geométrica em termos do campo de um monopólio e de um ângulo sólido definido no espaço de parâmetros.

Finalizamos a primeira parte com a análise da formulação de D.H. Kobe⁽¹³⁾ para a fase de Berry. Na secção (I.4) e no apêndice (I) estenderemos a formulação invariante por transformações de gauge para a Mecânica Quântica não-relativística, apresentada por Yang⁽¹⁵⁾, à dedução original da fase de Berry. Elucidando a relação entre grandezas observáveis e a invariância de gauge (apêndice (I)) argumentaremos que a energia e o hamiltoniano de um sistema devem se modificar de maneira diversa, sob transformações unitárias dependentes do tempo. Apresentaremos a dedução da fase de Berry em sua forma invariante a partir das equações de Schrödinger e de autovalores para o operador energia, sem nos restringir a sistemas que evoluem cíclica ou adiabaticamente. Esperamos que a reformulação invariante por transformações unitárias nos possibilite uma visão mais clara do conteúdo físico da fase de Berry.

Na segunda parte da dissertação (Capítulo II e III), procuraremos analisar em detalhes as diferentes manifestações da fase de Berry.

Na secção (II.1) reinterpretaremos o efeito Aharonov-Bohm, à

luz dos trabalhos originais de Berry^[2]. Esta é uma manifestação na qual o caráter adiabático da evolução do sistema não se faz necessário.

Apresentaremos na seção (II.2) os trabalhos de Wilczek, Zee, Moody e Shapere^[6,7,8] que generalizam a aproximação Born-Oppenheimer, utilizada no estudo de moléculas. Em sua formulação, introduzem o potencial de Berry como uma primeira correção à aproximação Born-Oppenheimer original^[9]. Consideram a contribuição das transições entre os níveis eletrônicos para a equação efetiva dos núcleos moleculares^[8]. Apresentaremos potenciais de Berry não-abelianos, para o caso de uma molécula biatômica com níveis bidegenerados^[7].

Na seção (II.3) discutiremos a experiência proposta por Chiao e Wu^[10] para determinar a manifestação da fase de Berry em sistemas ópticos. Considerando a propagação de um foton linearmente polarizado numa fibra óptica, Chiao e Wu previram que o plano de polarização seria rodado por um ângulo, expresso em função da fase de Berry. Suas previsões foram confirmadas experimentalmente por Tomita e Chiao^[11].

Compararemos a formulação de Berry^[2] e a de Aharonov-Anandan^[3], para uma partícula de spin $1/2$ na presença de um campo magnético dependente do tempo, na seção (II.4). Obteremos para ambas as formulações fases de Berry proporcionais a ângulos sólidos. Berry relacionou a fase com o campo de um monopólo localizado na origem do espaço de parâmetros. Também relacionou à um ângulo sólido definido nesse espaço. Aharonov e Anandan associaram a fase

ao ângulo sólido delimitado pela trajetória do spin da partícula ao redor do campo magnético.

Finalmente, na secção (II.5) e apêndice (2), estudaremos o trabalho de Berry⁽¹²⁾, em que resgata as contribuições de Pancharatnam⁽¹³⁾. Relacionaremos a fase de Pancharatnam para estados de polarização da luz com a de Berry (prevista por Chiao e Wu)⁽¹⁰⁾ para a propagação do fóton linearmente polarizado numa fibra óptica. Discutiremos o significado da conexão de Pancharatnam, que nos permite comparar fases entre dois estados, não necessariamente "vizinhos" na esfera dos estados de polarização da luz.

Finalmente no capítulo III analisaremos à luz dos trabalhos de Kobe, o oscilador harmônico generalizado, dependente do tempo (OHG)⁽¹⁴⁾ e uma partícula de spin 1/2 na presença de um campo magnético arbitrário, dependente do tempo (SMT)⁽¹⁵⁾. Discutimos pessoalmente com o Prof. D.H. Kobe a sua formulação invariante de Gauge para a fase de Berry. Esta formulação independe da condição de adiabaticidade para evolução do sistema. Tivemos oportunidade de estudar sua formulação para o oscilador harmônico generalizado, dependente do tempo.

Na secção (III.1) determinaremos as equações de movimento clássicas e a energia para o O.H.G. Para este sistema, a energia não corresponde à hamiltoniana. Também, no caso quântico, o O.H.G. apresenta o operador energia diferente do hamiltoniano. Determinaremos as equações de movimento para as amplitudes de probabilidade, em função de grandezas invariantes por

transformações unitárias. As fases de Berry para os autoestados do operador energia do sistema são nulas. Demonstraremos que as fases de Berry e os autovalores para a energia são separadamente invariantes por transformações unitárias. Conseqüentemente, a fase total se mantém invariante. Discutiremos a formulação de Rohrlich⁽¹⁴⁾ e de Gerbert⁽¹⁵⁾ para o O.H.G. Estes autores não distinguem o operador hamiltoniano da energia do sistema. Portanto, os autovalores para a energia e a fase de Berry não são invariantes por transformações unitárias. Mostraremos que no limite adiabático, a fase total invariante coincide com a não-invariante.

Na secção (III.2), resolveremos de modo exato o problema de uma partícula de spin $1/2$ em um campo magnético dependente do tempo. Obteremos os autoestados e autovalores para o operador energia do (SMT) e as equações de movimento para as amplitudes de probabilidade. Consideraremos o sistema descrito num referencial "girante". Demonstraremos que os autovalores para a energia e as fases de Berry, determinadas no referencial de laboratório, são iguais aos obtidos no referencial "girante". Também neste caso, discutiremos a formulação de Rohrlich⁽¹⁴⁾ de Gerbert⁽¹⁵⁾.... Estes não distinguem o operador hamiltoniano da energia do sistema, no referencial "girante". Obtém-se os autovalores para a energia e as fases de Berry diferentes para o referencial de laboratório e para o "girante". No limite adiabático, a fase total invariante coincide com a não-invariante para o referencial "girante".

Este problema será publicado sob o título: " Berry phase and probabilities for a spin one-half particle in a nonadiabatic magnetic field"⁽²²⁾, do qual participei em sua formulação.

O Fator de Fase na Mecânica Quântica⁽¹⁶⁾ - A Fase de Berry

Em Mecânica Quântica, um estado físico é representado por um vetor de estado $|\psi(t)\rangle$, elemento de um espaço vetorial complexo. Postula-se que $|\psi\rangle$ contém informação completa a respeito do estado físico, a qual obtemos pelo processo de medida de um conjunto completo de observáveis. O conjunto dos vetores $|\psi\rangle$ que diferem entre si por um número complexo, não nulo, representa o mesmo estado físico. A este corresponde um espaço vetorial unidimensional. O produto $\langle\psi|\psi\rangle$ é interpretado como a densidade de probabilidade de se encontrar a partícula em um ponto do espaço. Logo usamos vetores de estado normalizados à unidade (segundo a norma definida no espaço vetorial complexo) para indicar os estados físicos.

Consideremos uma partícula, cujo estado é representado pelo vetor normalizado $|\psi(t)\rangle$, função da posição r e do tempo t . Expressemos $|\psi\rangle$ da seguinte forma

$$|\psi\rangle = A e^{\frac{i}{\hbar} S} \quad (1)$$

onde A e S/\hbar são funções reais de r e t . Denominamos amplitude e fase as funções A e S/\hbar , respectivamente. Em cada instante t , o estado da partícula estará determinado a menos de uma constante de módulo um, que não apresenta manifestação física. Essa indeterminação na fase de $|\psi\rangle$ provém da liberdade em adicionar constantes arbitrárias à S/\hbar .

A densidade de probabilidade independe da fase de $|\psi\rangle$, portanto, qualquer indeterminação na fase não manifestará

consequências em $\langle \psi | \psi \rangle$.

Por hipótese S/\hbar não tem valor definido em cada ponto do espaço, mas a diferença entre o valor da fase em dois pontos vizinhos está bem determinada. Para dois pontos distantes, haverá uma diferença de fase definida, que depende da trajetória que os une. Neste caso, a mudança de fase não é necessariamente nula, quando o estado percorre uma curva fechada τ .

Analisemos as condições necessárias para que este fator de fase não-integrável não dê origem a ambiguidades no formalismo quântico. Vimos, anteriormente, que o produto $\langle \psi | \psi \rangle$ está bem definido, pois independe da fase do estado. Consideremos dois estados $|\psi_m\rangle$ e $|\psi_n\rangle$ que a partícula pode assumir. O produto $\langle \psi_n | \psi_m \rangle$ é interpretado como a densidade de probabilidade de transição entre os estados m e n . Para que esse produto tenha um valor bem determinado

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int d^3r \psi_n^* \psi_m = \int d^3r A_n A_m e^{\frac{i}{\hbar}(S_m - S_n)} \quad (2)$$

a função $(S_m - S_n)$ deve estar bem definida entre dois pontos quaisquer, embora os estados não necessitem ter uma fase definida em cada ponto. A diferença de fase ΔS entre dois pontos x_0 e x_1 , é caracterizada por

$$\Delta S = \int_{x_0}^{x_1} \nabla_r (S_m - S_n) \cdot d^3r = (S_m - S_n) \Big|_{x_0}^{x_1} \quad (3)$$

Logo, essa diferença será nula num caminho fechado τ . A variação da fase de $|\psi_m\rangle$ ao longo de τ será igual e oposta à de $\langle \psi_n|$, ou seja, igual à variação na fase de $|\psi_n\rangle$. Portanto: "the change in phase of a wave function round any closed curve must be the same for all the wave functions"^[10].

A não-integrabilidade da fase é consistente com o princípio de superposição. Sejam os estados $|\psi_m\rangle$ e $|\psi_n\rangle$. Sabemos que a variação na fase ao longo de um caminho fechado Γ é a mesma para $|\psi_m\rangle$ e $|\psi_n\rangle$. Logo, uma combinação linear dos dois estados terá essa mesma variação na fase ao longo de Γ .

Vamos aprofundar nossa discussão sobre a questão da fase não-integrável. Primeiramente, expressamos o estado $|\psi\rangle$, de maneira mais geral que em (1), sob a forma

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \cdot e^{\frac{i}{\hbar}S} \quad (4)$$

onde $|\psi_1\rangle$ é um estado com uma fase definida em cada ponto. A incerteza na fase está presente no fator $\exp(\frac{i}{\hbar}S)$. Supondo que esse fator não é integrável, então S não é uma função de x_1, x_2, x_3, t com valor bem definido em cada ponto, mas deve ter derivadas definidas

$$k_1 = \frac{\partial S}{\partial x_1}, \quad k_2 = \frac{\partial S}{\partial x_2}, \quad k_3 = \frac{\partial S}{\partial x_3}, \quad k_0 = \frac{\partial S}{\partial t} \quad (5)$$

Estas não satisfazem, em geral, as condições de integrabilidade

$$\frac{\partial k_1}{\partial x_2} = \frac{\partial k_2}{\partial x_1}, \dots \quad (6)$$

Voltemos a discutir a consistência do fator de fase não-integrável e o princípio de superposição. Podemos usar o mesmo fator de fase $\exp(\frac{i}{\hbar}S)$ para representar diferentes estados do sistema (4). Logo, uma combinação linear de estados será expressa pelo mesmo fator $e^{\frac{i}{\hbar}S}$. Este determina a variação da fase ao longo de um caminho fechado. Embora usemos o mesmo $\exp(\frac{i}{\hbar}S)$ para tratar com todos os estados do sistema, nada nos obriga a tomar o mesmo k . Podemos empregar k 's, diferindo entre si pelo gradiente de um escalar, para expressar diferentes estados (apenas $\nabla_n k$ está

fixado).

Vamos, a seguir, verificar que os estados $|\psi\rangle$ e $|\psi_1\rangle$ não satisfazem a mesma equação de evolução. Consideremos a derivada $\frac{\partial}{\partial x^\mu}$. Quando aplicada ao estado $|\psi\rangle$ (4), resulta em

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} |\psi\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}S} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu} + \frac{\partial S}{\partial x^\mu} \right) |\psi_1\rangle \quad (7)$$

Portanto, se $|\psi\rangle$ satisfaz uma equação de evolução envolvendo os operadores momentum p e energia E , $|\psi_1\rangle$ obedecerá uma equação de evolução correspondente em que substituímos:

$$p_\mu \rightarrow p_\mu + \frac{\partial S}{\partial x^\mu} \quad (8)$$

Em outras palavras, se $|\psi_1\rangle$ satisfaz uma equação de evolução que contenha a derivada $\frac{\partial}{\partial x^\mu}$, $|\psi\rangle$ obedecerá uma equação correspondente, em que a derivada $\frac{\partial}{\partial x^\mu}$ foi substituída por $\frac{\partial}{\partial x^\mu} + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial x^\mu}$.

Se $|\psi\rangle$ satisfaz a equação de evolução para uma partícula livre de interações, $|\psi_1\rangle$ irá satisfazer a equação de evolução de uma partícula de carga q movendo-se na presença de um campo eletromagnético, cujos potenciais são

$$A = \frac{\hbar}{q} (k_1, k_2, k_3) \quad A_0 = -\frac{\hbar}{q} k_0 \quad (9)$$

Portanto, a introdução de um fator de fase não-integrável equivale à introdução de potenciais eletromagnéticos, por meio do acoplamento mínimo (8). O fator de fase não integrável é definido, para uma curva unindo os pontos x_0 e x_1 , da seguinte forma

$$\Phi = \exp\left(\frac{i}{\hbar} q \int_{x_0}^{x_1} A_\mu dx^\mu\right) \quad (10)$$

sob uma transformação de gauge, o fator de fase é invariante

$$\Phi \rightarrow \exp\left(\frac{i}{\hbar} q \Lambda(x_1)\right) \Phi \exp\left(-\frac{i}{\hbar} q \Lambda(x_0)\right) \quad (11)$$

pois $\exp\left(\frac{i}{\hbar} q \int \Lambda(x_1)\right)$ e $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} q \int \Lambda(x_0)\right)$ são constantes para toda curva unindo os pontos x_0 e x_1 .

Nas palavras de Wu e Yang^[17]: "Eletrromagnetism is thus the gauge-invariant manifestation of a nonintegrable phase factor". Para o eletromagnetismo o fator de fase não-integrável, numa dada curva, é um elemento do grupo abeliano $U(1)$. Wu e Yang^[17] propuseram uma generalização do conceito de fator de fase, para teorias de Gauge-não abelianas. Nestas teorias, o fator de fase não-integrável será um elemento de um grupo de Lie não-abeliano.

Consideremos um operador hamiltoniano $H(R(t))$ que depende continuamente de parâmetros $R \in M$, onde M é uma variedade diferenciável. Denominamos M de espaço de parâmetros. Assumamos que existe uma diferença finita entre os autovalores discretos de $H(R)$. Quando R percorre a imagem de uma curva em M , por hipótese não ocorre cruzamento entre os autovalores. Neste contexto, o teorema adiabático quântico^[18] pode ser assim expresso: variando os parâmetros R lentamente ao longo de uma curva em M , um autoestado do operador hamiltoniano mantém-se no autoestado correspondente durante a evolução.

Recentemente, Berry^[2] resgatou o fator de fase geométrico que havia sido ignorado no teorema adiabático quântico. Berry demonstrou que um estado quântico $|\psi\rangle$, quando transportado adiabaticamente ao longo de um laço em M , adquire um fator de fase geométrico em adição ao dinâmico ($|\psi\rangle$ é um autoestado do operador $H(R)$).

Simon^[18] reconheceu que a fase de Berry é devida à

holonomia de uma conexão definida num "line bundle" sobre o espaço de parâmetros M . Definiu um fibrado vetorial sobre M , associando a cada ponto $R \in M$ o autoespaço correspondente ao nível de energia $E_n(R)$. Este fibrado vetorial é um subfibrado de $M \times \mathcal{H}$, onde \mathcal{H} é o espaço de Hilbert dos estados quânticos. Uma transformação adiabática em $H(R)$ pode ser interpretada como um transporte paralelo no fibrado vetorial sobre M , sob a conexão de Berry. Esta conexão permite-nos comparar os estados em pontos vizinhos do fibrado. Simon observou que este transporte paralelo tem a seguinte propriedade

$$\left\langle \psi \left| \frac{d}{dt} \psi \right. \right\rangle = 0 \quad (12)$$

Uma mudança infinitesimal de um autoestado $|\psi_n\rangle$ é ortogonal ao autoespaço a que $|\psi_n\rangle$ "pertence". Concluiu que a evolução de um sistema (quando o fator de fase dinâmico é removido) é o transporte paralelo dos estados do sistema sob a conexão de Berry A . A fase geométrica é a integral da curvatura A sobre uma região do "line bundle". A fase depende da curva percorrida no fibrado.

A formulação original de Berry e Simon foi generalizada por Wilczek e Zee⁽⁶⁾. Estes consideraram hamiltonianos com espectro degenerado. Para tais casos, obtiveram potenciais de gauge não-abelianos.

Anteriormente ao estudo de Wilczek e Zee da aproximação Born-Oppenheimer (B.O.) para moléculas, alguns químicos⁽¹⁰⁾ observaram que não seria possível escolher sempre as fases dos autoestados eletrônicos univaloradas e reais. Analisando o espectro dos níveis vibracionais dos núcleos, perceberam que se deveria adicio-

nar ao hamiltoniano nuclear efetivo, previsto na aproximação B.O., um termo semelhante a um potencial vetor. À luz dos trabalhos de Berry⁽¹²⁾, Wilczek e Zee propuseram uma generalização da aproximação B.O., introduzindo o potencial de Berry como uma correção a esta aproximação. O potencial será não-abeliano para autoestados eletrônicos degenerados. Quando os núcleos percorrem um caminho fechado no espaço, os estados eletrônicos adquirem a fase de Berry.

Segert⁽²⁰⁾ estudou uma família de operadores da forma: $H_k = H_0 + K.V$, onde H_0 é um operador invariante por rotações, V um operador vetorial e K um vetor unitário em R . Obteve, para o caso do espectro de H_k não degenerado, que existe somente uma conexão riemanianna invariante sob ação de um elemento do grupo das rotações. Esta conexão é definida no "line-bundle" do sistema, cuja base é o espaço dos vetores unitários: S^2 . A evolução do sistema, no limite adiabático, é dada pelo transporte paralelo a conexão invariante. Esta conexão invariante é a de Berry. No caso do espectro de H_k com uma dupla degenerescência, considerou um fibrado vetorial sobre S^2 , em que a fibra é um espaço vetorial complexo, bidimensional. Se os estados degenerados $|j_i, m_i\rangle$ (correspondentes a um nível de energia) têm números quânticos J, K consecutivos: $m_1 - m_2 = \pm 1$, existe mais de uma conexão invariante por rotações. Neste caso, a equação de Schrödinger determina univocamente a conexão, relacionada com a evolução do sistema. Se os números quânticos dos dois estados degenerados não satisfazem a igualdade anterior, podemos identificar a conexão de Berry

Berry como a única riemanianna invariante por rotações. Vinet⁽²¹⁾ demonstrou que a conexão de Berry é invariante (a menos de uma transformação de gauge) sob a ação de um grupo de simetria no espaço de parâmetros. Os resultados de Segert⁽²⁰⁾ exemplificam assim a afirmação anterior. Jackiw⁽²²⁾ estudou como as simetrias de um sistema determinam a conexão de Berry e como as leis de conservação são afetadas quando a fase geométrica está presente no sistema.

Recentemente, Aharonov e Anandan⁽¹⁸⁾ estudaram evoluções cíclicas de estados quânticos em que um fator de fase geométrica pode ser associado a cada curva fechada, definida no espaço de Hilbert projetivo. Este fator depende somente do caminho no espaço projetivo (independe da forma do hamiltoniano), o que nos permite remover a restrição de evolução adiabática. Page⁽²³⁾ estudou o caso de dimensão finita, no qual a fase geométrica é expressa em função da holonomia de estruturas geométricas definidas no espaço projetivo.

Consideremos hamiltonianas clássicas dependentes de um conjunto de parâmetros que variam no tempo. Segundo Hannay⁽²⁴⁾ e Berry⁽²⁵⁾ as variáveis angulares de um sistema clássico integrável adquirem ângulos, os ângulos de Hannay, (com adição a integral das frequências instantâneas) durante um ciclo percorrido adiabaticamente no espaço das hamiltonianas integráveis. Os ângulos de Hannay $\Delta\theta$ estão relacionadas ao limite semi-clássico da fase de Berry γ_n , da seguinte maneira

$$\Delta\theta = \lim_{\hbar \rightarrow \infty} - \frac{\partial \gamma_n}{\partial n} \quad (13)$$

A fase de Berry tem sido confirmada para diferentes sistemas. Chiao e Wu⁽¹⁰⁾ previram que a rotação observada na direção de polarização de um fóton, propagando-se em uma fibra ótica helicoidal era igual à fase de Berry. Confinando um feixe de laser numa fibra ótica, Chiao e Tomita⁽¹¹⁾ confirmaram a presença da fase geométrica num sistema ótico.

No entanto, as evidências da fase de Berry em sistemas óticos originaram discussões, no sentido de se determinar a origem clássica ou quântica dos efeitos observados (Haldane⁽¹²⁾, Segert⁽²⁷⁾).

Na década de 50, Pancharatnam⁽¹³⁾ havia tratado classicamente fenômenos óticos em que se manifestam diferenças de fase nos estados de polarização da luz. Em seus estudos, Pancharatnam mostrou que uma mudança cíclica nestes estados é acompanhada por uma diferença de fase (denominada fase de Pancharatnam), proporcional a um ângulo sólido no espaço dos estados de polarização. Recentemente, Ramasesham, Nityananda⁽²⁸⁾ e Berry⁽¹²⁾ retomaram os trabalhos de Pancharatnam. Berry estabeleceu uma relação precisa entre a fase de Pancharatnam e a geométrica, afirmando que a fase adquirida pelos autoestados de polarização é um "análogo ótico ao efeito Bohm-Aharonov". A não transitividade da conexão de Pancharatnam para diferentes estados, origina a fase adquirida durante uma mudança cíclica da polarização.

Uma série de experiências confirmam a dependência da fase geométrica de sistemas (em que a direção do spin roda) ao ângulo sólido, a saber,

- (a) nêutrons em um campo magnético helicoidal (29)
- (b) espectro de ressonância de quadrupolo nuclear para uma amostra rodando lentamente (30)
- (c) efeito Hall quântico (31)
- (d) interferometria para ressonância magnética nuclear de um sistema de três níveis (32).

Cogitou-se na possibilidade de se remover a fase de Berry por meio de transformações unitárias [14,15,34]. Nesta formulação, a soma da fase dinâmica com a de Berry deveria permanecer inalterada sob a ação de transformações unitárias. Kobe^[4] desenvolveu uma formulação na qual a fase de Berry e a energia são separadamente invariantes por transformações unitárias. Inspirado no postulado de que uma transformação unitária não deve modificar uma grandeza física observável, Kobe encontrou nos trabalhos de K.H. Yang^[5] uma formulação da Mecânica Quântica não-relativística invariante por transformações de gauge. Yang observou que o hamiltoniano para uma partícula carregada na presença de um campo eletromagnético clássico, função do tempo, depende do gauge escolhido. Postula-se que um operador correspondente à uma observável física, seja hermitiano e formalmente invariante por transformações de gauge. Também seu valor esperado deve ser independente do gauge escolhido. Portanto, o hamiltoniano para uma partícula na presença de um campo eletromagnético clássico, dependente do tempo não pode ser o operador energia do sistema. Este operador, deve ser manifestamente invariante e definido como a soma das energias cinética e potencial. Yang definiu amplitudes de probabilidade

invariantes por transformações de gauge, usando os autoestados do operador energia do sistema.

Operadores que representam grandezas físicas e possuem um análogo clássico, devem satisfazer o teorema de Ehrenfest. Neste sentido, a variação temporal do valor esperado do operador energia deve ser igual ao valor esperado do operador potência.

Em sua formulação, Kobe^[1] constrói o operador energia a partir das equações de movimento para o sistema. Nos sistemas em que o operador energia não é o hamiltoniano, a diferença qA_0 entre os operadores é introduzida na definição da fase de Berry. Sob uma transformação unitária, qA_0 se modifica como a componente zero de um potencial de gauge. Kobe postula que a equação de Schrödinger e a de autovalores para o operador energia são invariantes sob transformações unitárias. Verificou que a energia e o operador hamiltoniano se modificam diferentemente sob essas transformações. A diferença entre o hamiltoniano e a energia transformados é assim, introduzida na definição da fase de Berry. Até mesmo para sistemas em que a energia é o hamiltoniano, a fase de Berry para os autoestados transformados conterá a diferença entre os operadores transformados. Empregando a definição de Kobe para a fase de Berry e os autoestados da energia do sistema, a mesma fase é obtida para qualquer escolha de gauge. Os autovalores do operador energia também são invariantes, nesta formulação. Assim Kobe define a fase de Berry e os autovalores da energia de maneira invariante, separadamente. No limite adiabático, a fase total invariante coincide com a soma da fase dinâmica e a de Berry

dependentes de gauge. As amplitudes de probabilidade, quando usados os autoestados da energia, satisfazem equações de movimento que relacionam grandezas invariantes. No caso de sistemas dependentes do tempo, a variação temporal da energia é expressa pelo operador potência, em sua formulação invariante.

Não é necessário que a evolução do sistema seja adiabática ou cíclica para que a definição invariante da fase de Berry possa ser aplicada.

I. O FATOR DE FASE GEOMETRICO NAO-INTEGRABEL

I.1 A formulacao de Berry

Um sistema físico evolui ciclicamente quando seus estados inicial e final assumem o mesmo conjunto de valores observados. Caracterizam-se estes valores pela medida do conjunto completo das observáveis físicas. Classicamente, não há diferença entre estes estados. Tudo se passa, como se não houvesse ocorrido a evolução do sistema. Quanticamente, ele lembra sua evolução, pois adquire um fator de fase. Este fator pode ser determinado por meio da interferência do estado do sistema com outro coerente, mas de evolução distinta⁽⁴⁾. Berry⁽²⁾ caracterizou uma contribuição geométrica no fator de fase, adquirida por um autoestado, durante a evolução cíclica do sistema. Considerou sistemas descritos por hamiltonianos H que dependem de um conjunto de parâmetros. Estes são funções do tempo que se transformam lentamente. No espaço de Hilbert, o autoestado é transportado adiabaticamente ao longo de uma curva fechada.

Passemos agora à obtenção da fase de Berry em sua formulação original⁽²⁾. Denotaremos as coordenadas dinâmicas por: $q(t) \doteq q$ e a hamiltoniana por: $\hat{H}[q, p, R(t)] = \hat{H}[\hat{R}]$, cujos parâmetros são $R(t) \doteq R$. A equação de Schrödinger para o estado é dada por

$$\hat{H}[R] |\Psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle. \quad |\Psi(q, R(t), t)\rangle = |\Psi(t)\rangle \quad (1)$$

A cada instante t , teremos um conjunto completo e ortonormal das autofunções $|\Psi_n[q, R(t), t]\rangle \doteq |\Psi_n\rangle \doteq |n\rangle$ do operador energia \hat{E} que satisfazem

$$\hat{E} |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle. \quad \hat{E} \doteq E[q, p, R(t)] \quad (2)$$

onde $E_n(R)$ é o autovalor da energia correspondente ao autoestado $|\psi_n\rangle$. No instante t , a amplitude de probabilidade de encontrar o sistema em um autoestado $|\psi_n(t)\rangle$, é dada pelo produto:

$$a_n(t) \doteq \langle \psi_n | \Psi \rangle \quad \cdot \quad a_n(t) \doteq a_n \quad (3)$$

O estado $|\Psi(t)\rangle$ pode ser expresso na base das autofunções do operador \hat{E} , a saber,

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |\psi_n\rangle \quad (4)$$

Os coeficientes $a_n(t)$ são obtidos pelo produto indicado em (3). Neste ponto, identificamos a energia com a hamiltoniana H do sistema. Quando substituimos a expressão (4) na equação de Schrödinger (1), empregando (2) e (3), obtemos para as amplitudes $a_n(t)$, o seguinte conjunto de equações de movimento:

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} - E_n a_n + \langle \psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n \rangle a_n = - \sum_{l \neq n} \langle \psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_l \rangle a_l \quad (5)$$

O membro à direita na equação (5) contém as amplitudes de probabilidade de transição do estado n para $l \neq n$. Diferenciando, em relação ao tempo, a equação de autovalores para o operador \hat{E} (2), obtemos o elemento

$$\langle \psi_n | \frac{\partial}{\partial t} \psi_k \rangle = \frac{\langle \psi_n | \frac{\partial H}{\partial t} | \psi_k \rangle}{E_k - E_n} \quad (6)$$

para $k \neq n$ e os autoestados de H não degenerados.

Se num período de Bohr $T = \frac{2\pi}{\omega_{kn}}$ para a transição de autoestados $|\psi_n\rangle$ para $|\psi_k\rangle$ a variação do hamiltoniano com respeito ao tempo é pequena, comparada à diferença entre os níveis de energia dos dois autoestados

$$\frac{1}{T} \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right| \ll E_k - E_n \quad \omega_{kn} = \frac{1}{\hbar} (E_k - E_n) \quad (6a)$$

portanto, as equações de movimento para as amplitudes $a_n(t)$ simplificam-se em

$$i\dot{a}_n - \epsilon_n a_n + \langle \psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n \rangle a_n = 0 \quad (7)$$

Esta aproximação é conhecida como adiabática. Supomos o autoestado do sistema transportado adiabaticamente, de modo que a não induzir transições para outros autoestados. Se o sistema for preparado em $|\psi_n(R(0))\rangle$, ele evoluirá no tempo, permanecendo em $|\psi_n(R(t))\rangle$. Assim, se $a_n(0) = \delta_{ne}$, podemos integrar a equação de movimento (7) e obter a amplitude de probabilidade na aproximação adiabática

$$a_n(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \epsilon_n(t') dt'\right) \cdot \exp\left(i \int_0^t \langle \psi_n(t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \psi_n(t') \rangle dt'\right) \quad (8)$$

O transporte adiabático resulta num fator de fase, que se soma ao fator dinâmico esperado $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \epsilon_n(t') dt'\right)$.

Postula-se que um estado físico é representado por um vetor de estado $|\psi\rangle$ pertencente a um espaço de Hilbert \mathcal{H} . Para um número complexo C , não-nulo, os vetores $|\psi\rangle$ e $C|\psi\rangle$ representam o mesmo estado físico. Em outras palavras, os raios (vistos como classes de equivalência) são os elementos significativos na descrição do sistema físico. Em nosso caso, acreditava-se que o fator de fase geométrico: $\exp\left(i \int_0^t \langle \psi_n(t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \psi_n(t') \rangle dt'\right)$ presente em (8) pudesse ser absorvido em $|\psi_n(t)\rangle$, mediante uma redefinição de fase. Supunha-se que esta não implicaria em perda de informação sobre o estado do sistema^[85].

Berry idealizou uma experiência de interferência para detectar uma diferença de fase, provinda do fator geométrico.

Considerou sistemas em que os parâmetros $R(t)$ variam lentamente com o tempo. Os operadores hamiltonianos são iguais nos instantes $t = 0$ e $t = T$: $\hat{H}[R(0)] = \hat{H}[R(T)]$. Os sistemas são transportados ao longo de curvas $\Gamma(t)$, definidas no espaço de parâmetros, em que $\Gamma(0) = \Gamma(T)$. Os autoestados de $H[R(t)]$ retornam aos raios originais, mas acrescidos do fator de fase geométrico. Se um sistema é separado em dois subsistemas:

(i) num deles, o autoestado do hamiltoniano $H[R(t)]$ é transportado ao longo de uma curva fechada Γ .

(ii) no outro, o autoestado evolui segundo um hamiltoniano mantido constante $H[R(0)]$.

Ao recombiná-los em $t = T$, devemos observar por meio de interferência uma diferença de fase entre os autoestados.

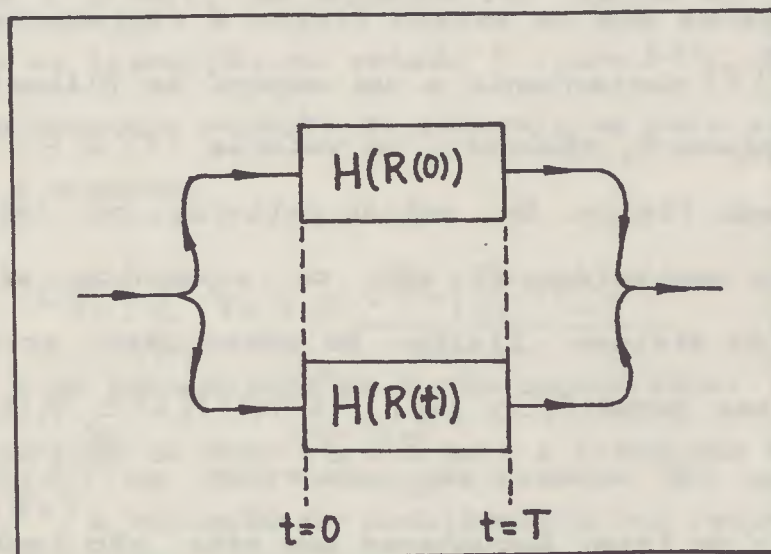


fig.1

Experiência de interferência idealizada para determinar a manifestação da fase de Berry.

Esta diferença de fase, adquirida pelo autoestado durante o transporte ao longo de uma curva fechada Γ , denominamos fase de Berry, definida como:

$$\gamma_n(\Gamma) = \int_0^T \langle \psi_n(t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \psi_n(t') \rangle dt' \quad (9)$$

(Γ é parametrizada por t).

Se os autoestados não dependem explicitamente do tempo, mas sim os parâmetros $\mathbb{R}(t)$, podemos expressar a fase de Berry $\gamma_n(\Gamma)$ como a integral de linha:

$$\gamma_n(\Gamma) = \oint_{\Gamma} \langle \psi_n[\mathbb{R}] | i\hbar \nabla_{\mathbb{R}} \psi_n[\mathbb{R}] \rangle d\mathbb{R} \quad (10)$$

onde $\nabla_{\mathbb{R}}$ opera em \mathbb{R} .

O ponto importante de (10) consiste na fase γ_n não-integrável. Ela assume diferentes valores conforme a escolha da curva Γ no espaço de parâmetros. Devido à integração nas coordenadas desse espaço, a fase não pode ser expressa como função de $\mathbb{R}(t)$.

Escolhemos $|\psi_n[\mathbb{R}]\rangle$ normalizada: $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1$. A derivada temporal deste produto é nula: $\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_n | \psi_n \rangle = 0$. Podemos reescrever os termos da expressão anterior: $\langle \frac{\partial}{\partial t} \psi_n | \psi_n \rangle + \langle \psi_n | \frac{\partial}{\partial t} \psi_n \rangle = 0$ e verificar que cada termo é o complexo conjugado do outro. Portanto, cada um deles é um imaginário "puro" e a fase de Berry $\gamma_n(\Gamma)$ real.

Vamos introduzir um "potencial vetor", definido no espaço de parâmetros:

$$A(\mathbb{R}) = i\hbar \langle \psi_n(\mathbb{R}) | \nabla_{\mathbb{R}} \psi_n(\mathbb{R}) \rangle \quad (11)$$

de maneira a reescrever a equação (10) com este "potencial":

$$\gamma_n(\Gamma) = \oint_{\Gamma} A_n(\mathbb{R}) \cdot d\mathbb{R} \quad (12)$$

Em analogia com o eletromagnetismo, o "potencial vetor" $A(\mathbb{R})$ possui invariância por transformação de Gauge. Se a fase de $|\psi_n(\mathbb{R})\rangle$ é modificada, o "potencial vetor" altera-se por um gradiente:

$$\begin{aligned} |\psi_n(\mathbb{R})\rangle &\rightarrow e^{i\Lambda(\mathbb{R})} |\psi_n(\mathbb{R})\rangle \\ A_n(\mathbb{R}) &\rightarrow A_n(\mathbb{R}) + i \nabla_{\mathbb{R}} \Lambda(\mathbb{R}) \end{aligned} \quad (13)$$

Notemos que a invariância de Gauge da fase de Berry já era esperada. Podemos interpretar esta fase como o "fluxo" de um "campo magnético" (invariante de Gauge) através da área D limitada pelo caminho adiabático no espaço de parâmetros

$$\gamma_n(\Gamma) = \oint_{\Gamma} d\mathbb{R} \cdot A_n(\mathbb{R}) = \int_D dS \cdot (\nabla \wedge A_n) = \int_D dS \cdot B_n(\mathbb{R}) \quad (14)$$

$$B_n(\mathbb{R}) = \nabla_{\mathbb{R}} \wedge A_n(\mathbb{R}) \quad (14a)$$

Utilizamos o teorema de Stokes para expressar a integral de linha (12) como a integral sobre a superfície D cujo bordo ∂ é o caminho adiabático $\Gamma = \partial D$. Embora o autoestado $|\psi_n(\mathbb{R})\rangle$ e o potencial $A_n(\mathbb{R})$ dependam da escolha de fase (13), a curvatura B_n (14a) e a fase de Berry (14) são invariantes por transformações de Gauge.

Empregando elementos: rotacionais ∇_{Λ} , gradientes $\nabla_{\mathbb{R}}$, familiares ao cálculo vetorial em espaços bi ou tridimensionais, podemos interpretar (14) e (14a) em um contexto mais geral. Uma 2-forma $B_n(\mathbb{R})$ está definida no espaço fibrado sobre a variedade de parâmetros. Quando integrada em uma região D , bidimensional, cujo bordo é uma curva Γ , resulta em $\gamma_n(\Gamma)$. A 2-forma $B_n(\mathbb{R})$

independe da escolha de fase dos autoestados.

Devido à familiaridade com os espaços bi e tridimensionais e antecipando que interessantes aplicações são formuladas para o espaço tridimensional de parâmetros, detalharemos as expressões em (14):

$$\begin{aligned} \gamma_n(\Gamma) &= -\text{Im} \iint_D dS \cdot \nabla_R \wedge \langle \psi_n(R) | \nabla_R \psi_n(R) \rangle = i \iint_D dS \cdot \nabla \wedge \langle \psi_n(R) | \nabla_R \psi_n(R) \rangle \\ &= -\text{Im} \iint_D dS \cdot \langle \nabla_R \psi_n(R) | \wedge | \nabla_R \psi_n(R) \rangle \\ &= i \int_{\Gamma} dR \cdot \langle \psi_n(R) | \nabla_R \psi_n(R) \rangle \end{aligned} \quad (15)$$

onde $\nabla_R \wedge$ representa o rotacional e \wedge, χ : o produto exterior (ou vetorial).

Introduzindo os operadores $|m\rangle\langle m|$ que satisfazem $\sum_m |m(R)\rangle\langle m(R)| = \mathbb{1}$ ($\mathbb{1}$: unidade), reescreveremos o integrando em (15) como elementos da forma $\langle \psi_m | \nabla_R \psi_n \rangle$:

$$\gamma_n(\Gamma) = -\text{Im} \iint_D dS \cdot \sum' \langle \nabla_R \psi_n | \psi_m \rangle \wedge \langle \psi_m | \nabla_R \psi_n \rangle \quad (16)$$

onde \sum' significa que omitimos o caso $m = n$. Por argumentos similares que demonstram $\langle \psi_n | \frac{\partial}{\partial t} | \psi_m \rangle$ ser um imaginário "puro", podemos concluir que $\langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle$ é um imaginário puro. Sabemos que o produto de dois números imaginários puros é real. Portanto, o produto $\langle \nabla_R \psi_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle$ é real e não contribui na soma.

A partir da equação de autovalores para o operador energia (2), podemos expressar os produtos da seguinte forma:

$$\langle \psi_m | \nabla_R \psi_n \rangle = \frac{\langle \psi_m | \nabla_R \hat{H}(R) | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} \quad (17)$$

supondo que o operador energia tenha um espectro não degenerado.

Assim reescreveremos (14) introduzindo (16) e (17):

$$\gamma_n(\Gamma) = - \iint_D dS \cdot V_n(\mathbb{R}) \quad (18)$$

onde

$$V_n(\mathbb{R}) \doteq \text{Im} \sum_m' \frac{\langle \psi_n | \nabla_R \hat{H}(\mathbb{R}) | \psi_m \rangle_n \langle \psi_m | \nabla_R \hat{H}(\mathbb{R}) | \psi_n(\mathbb{R}) \rangle}{(\epsilon_m(\mathbb{R}) - \epsilon_n(\mathbb{R}))^2} \quad (19)$$

Vamos destacar que $\gamma_n(\Gamma)$ é zero: (i) se a região D é nula, (ii) ou se a curva Γ é percorrida de forma a voltar pelo mesmo trajeto até o ponto inicial a partir de um valor do parâmetro t . Em pontos vizinhos ao de degenerescência, a contribuição dos estados $|\psi_m\rangle$ passa a ser dominante em $V_n(\mathbb{R})$ e $\gamma_n(\Gamma)$. Como comentamos anteriormente, a 2-forma $B_n(\mathbb{R})$ no espaço fibrado generaliza a expressão (19). $B_n(\mathbb{R})$ é calculada empregando a derivada exterior d e o "produto exterior" \wedge .

I.2 A Formulação de Anandan-Aharonov⁽²⁾

Consideremos um vetor-normalizado $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$ que evolui de acordo com a equação de Schrödinger

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \quad (1)$$

Após um intervalo de tempo τ , o estado se caracteriza por $|\psi(\tau)\rangle = e^{i\phi} |\psi(0)\rangle$, onde ϕ é real. A evolução do sistema é representada por meio de uma curva Γ em \mathcal{H} . Em virtude da função $\pi: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{D}$ (que associa um vetor $|\psi\rangle$ em \mathcal{H} ao raio $|\tilde{\psi}\rangle$ que o contém) Γ pode ser projetada em uma curva $\tilde{\Gamma}$ em \mathcal{D} . Se $\tilde{\Gamma}$ é uma curva fechada, a evolução do sistema denomina-se cíclica. O

estado transportado ao longo dessa curva é designado cíclico.

No decorrer da evolução cíclica, o vetor estado adquire um fator de fase $e^{i\phi}$. Definamos um raio $|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{-i\alpha(t)} |\psi(t)\rangle$, tal que a função $\alpha(t)$ satisfaz $\alpha(\tau) - \alpha(0) = \phi$. Sob estas condições, conclui-se que: $|\tilde{\psi}(\tau)\rangle = |\tilde{\psi}(0)\rangle$. Derivando $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ em relação ao tempo, obtemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}(t)\rangle = \hbar \left(\frac{\partial \alpha(t)}{\partial t} \right) |\tilde{\psi}(t)\rangle + i\hbar e^{-i\alpha(t)} \frac{\partial}{\partial t} (|\psi(t)\rangle) \quad (2a)$$

Multiplicando (2a) por $\langle \tilde{\psi}(t) |$ resulta

$$i\hbar \langle \tilde{\psi}(t) | \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(t) \rangle = \hbar \left(\frac{\partial \alpha(t)}{\partial t} \right) + i\hbar \langle \psi(t) | \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) \rangle \quad (2b)$$

Empregando a equação de Schrödinger (1), reescrevemos (2b) desta forma:

$$\langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle = \langle \tilde{\psi}(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(t) \rangle - \hbar \left(\frac{\partial \alpha(t)}{\partial t} \right) \quad (2c)$$

Integrando a expressão (2c) entre 0 e τ a fase real ϕ resulta da soma da fase dinâmica (primeiro termo no lado direito da equação (3)) com a γ , a saber:

$$\phi = -\frac{1}{\hbar} \int_0^\tau \langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle dt + \int_0^\tau \langle \tilde{\psi}(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(t) \rangle dt \quad (3)$$

$$\gamma = \int_0^\tau \langle \tilde{\psi}(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(t) \rangle dt \quad (4)$$

A fase geométrica γ não depende de ϕ nem da forma da hamiltoniana H , para uma dada curva $\tilde{\Gamma}$. Também independe da parametrização de $\tilde{\Gamma}$ e está univocamente determinada a menos de $2\pi n$

($n = \text{inteiro}$). Uma escolha apropriada da função $\alpha(z)$, para toda curva Γ leva-nos ao mesmo raio $|\tilde{\psi}\rangle$. Assim concluímos que o fator de fase $e^{i\gamma}$ é uma propriedade geométrica da projeção de Γ no espaço dos raios \mathcal{P} .

Berry⁽¹²⁾ e Simon⁽¹⁰⁾ observaram que a fase γ é manifestação da geometria do espaço de parâmetros. Ela é a holonomia associada a uma conexão definida num "line bundle" hermitiano, cuja base é o espaço de parâmetros.

Aharonov e Anandan⁽¹³⁾ formularam este problema em termos de ciclos dos estados quânticos no espaço projetivo do sistema. A formulação original considera ciclos do operador hamiltoniano no espaço de parâmetros. Independente da evolução do hamiltoniano ser "adiabática", a fase geométrica (4) corresponde à fase de Berry $\gamma_n(\Gamma)$ (1.9) e (1.10), para a escolha $|\tilde{\psi}(t)\rangle = |\psi_n(t)\rangle$.

I.3 Sistemas com autoestados degenerados⁽¹⁴⁾

Estados degenerados formam um subespaço V_n de \mathcal{H} (espaço de Hilbert). Uma base natural para este subespaço é formada pelos autoestados $\langle |\psi_{n,i}(t)\rangle \rangle$ $i = 1, \dots, \dim V_n$ correspondentes ao nível degenerado E_n .

A evolução temporal dos vetores de V_n satisfaz a equação de Schrödinger. Se no intervalo de tempo $[0, \tau]$ temos $V_n(\tau) = V_n(0)$, denominamos a evolução de V_n cíclica. Suponhamos que o espaço \mathcal{H} do sistema possa ser decomposto em uma soma direta de dois subespaços de dimensão m e n , dependentes do tempo $\mathcal{H} = V_m(t) \oplus V_n(t)$. Suponhamos também que a evolução de $V_n(t)$ é cíclica, no intervalo

$(0, \tau)$. Seja $\langle |\psi_{n,a}(t)\rangle \rangle$ $a = 1, \dots, \dim V_n$ uma base ortonormal de V_n , em que os vetores satisfaçam $|\psi_{n,a}(\tau)\rangle = |\psi_{n,a}(0)\rangle$ para todo a . Outra base ortonormal de V_n é dada por $\langle |\phi_{n,a}(t)\rangle \rangle$ $a = 1, \dots, \dim V_n$. Os vetores, $|\phi_{n,a}(t)\rangle$ evoluem no tempo, segundo a equação de Schrödinger:

$$H |\phi_{n,a}(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\phi_{n,a}(t)\rangle \quad (1)$$

No instante inicial, $t = 0$, os vetores das diferentes bases são considerados iguais $|\psi_{n,a}(0)\rangle = |\phi_{n,a}(0)\rangle$. Em um instante t , os vetores da base $|\phi_{n,a}(0)\rangle$ podem ser caracterizados pela ação de um operador unitário $U(t)$ em $\langle |\psi_{n,b}(t)\rangle$

$$|\phi_{n,a}(t)\rangle = \sum_{b=1}^{\dim V_n} U_{ab}(t) |\psi_{n,b}(t)\rangle \quad (2)$$

Este operador satisfaz a condição inicial

$$U(0) = \mathbb{1} \quad (3)$$

Substituindo (2) na equação de Schrödinger (1), obtemos uma equação para o operador $U(t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} U(t) = (A^\dagger - T^\dagger) U(t) \quad (4)$$

na qual definimos os seguintes elementos de matriz:

(i) O potencial: $A_{ab}(t) = \langle \phi_{n,a} | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \phi_{n,b} \rangle$ (5)

(ii) O termo dinâmico: $T_{ab}(t) = \frac{1}{\hbar} \langle \phi_{n,a} | \hat{H} | \phi_{n,b} \rangle$ (6)

Uma expressão para o operador unitário $U(t)$, que satisfaz a equação de evolução (4) e a condição inicial (3), é dada por:

$$U(t) = \hat{T} \left\{ \exp i \int_0^t (A^\dagger - T^\dagger) dt' \right\} \quad (7)$$

em que \hat{T} denota "ordenamento temporal". Introduzimos o ordenamento

\hat{T} pois operadores $(\hat{A}^\dagger - \hat{T}^\dagger)(t)$ definidos em diferentes instantes, podem não comutar entre si. A evolução cíclica e adiabática do autoespaço degenerado V_n corresponde ao caso em que, somente existe contribuição dos elementos diagonais de $T_{ab}(t)$. Para os autoestados (t) degenerados, estes elementos são indicados assim:

$$\langle \phi_{n,a} | \hat{H}(t) | \phi_{n,a} \rangle = E(t) \quad a=1, \dots, \dim V_n \quad (8)$$

Esta expressão nos permite reescrever o operador unitário $U(t)$ (7), na forma:

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E(t') dt'} \cdot \hat{T} \left\{ e^{i \int_0^t A(t') dt'} \right\} \quad (9)$$

Sob uma transformação unitária $W(t)$, os vetores da base $|\phi_{n,b}(t)\rangle$ modificam-se da seguinte maneira:

$$|\phi'_{n,a}(t)\rangle = \sum_{b=1}^{\dim V_n} W_{ab}(t) |\phi_{b,n}(t)\rangle \quad (10)$$

O potencial $A(t)$ e o termo dinâmico $T(t)$ transformam-se, respectivamente em

$$\hat{A}' = W \hat{A} W^\dagger + i W^\dagger \dot{W} \quad T' = W^\dagger T W \quad (11)$$

O caso particular, em que a degenerescência envolve somente dois estados, foi discutido por Berry^[2]. Consideremos uma matriz hermitiana 2×2 , que depende de 3 parâmetros X , Y e Z , componentes de um vetor R . Esta matriz será expressa pelo produto $R \cdot \sigma$:

$$\hat{H}(R) = R \cdot \sigma = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} Z & X - iY \\ X + iY & -Z \end{pmatrix} \quad (12)$$

$\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ é o operador vetorial cujas componentes são as matrizes de Pauli. Admitamos que $\hat{H}(R) = \hat{E}$. Os autovalores para o

operador \hat{E} são

$$E_{\uparrow}(R) = -E_{\downarrow}(R) = \frac{1}{2} (X^2 + Y^2 + Z^2) = \frac{1}{2} |R|^2 \quad (13)$$

Os autovetores relacionados a $E_{\uparrow}(R)$ e $E_{\downarrow}(R)$ serão denotados, por $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$. No espaço de parâmetros, o ponto $R^* = 0$ corresponde no sistema físico a: $E_{\uparrow}(R^*) = E_{\downarrow}(R^*) = 0$. Logo, os autoestados $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ são degenerados.

Se os parâmetros $R(t)$, percorrem pontos vizinhos a R^* , a fase de Berry $\gamma(R)$ (1.18), (1.19) para um autoestado de $H(R)$ é dominada pela contribuição do outro. Em nosso caso, a degenerescência ocorre num ponto isolado, que corresponde às três componentes de R simultaneamente nulas. Para um ponto R vizinho a R^* , expressamos $V_{\uparrow}(R)$ (1.19) como o termo da expansão de $\hat{H}(R)$ (12) em primeira ordem na variável $R - R^*$:

$$V_{\uparrow}(R) = \text{Im} \frac{\langle \uparrow(R) | \nabla_R \hat{H}(R^*) | \downarrow(R) \rangle \langle \downarrow(R) | \nabla_R \hat{H}(R^*) | \uparrow(R) \rangle}{(E_{\uparrow}(R) - E_{\downarrow}(R))^2} \quad (14)$$

$$V_{\uparrow}(R) = -V_{\downarrow}(R) \quad (15)$$

O operador $\nabla_R \hat{H}$, calculado no ponto R^* , resulta:

$$\nabla_R \hat{H}(R^*) = \frac{1}{2} \sigma \quad (16)$$

O cálculo dos elementos de matriz $\langle \uparrow(R) | \frac{1}{2} \sigma | \downarrow(R) \rangle$ e $\langle \downarrow(R) | \frac{1}{2} \sigma | \uparrow(R) \rangle$ é simplificado, se rodamos temporariamente nosso eixo de coordenadas de forma que o vetor R tenha somente componentes no eixo OZ (do sistema rodado). Os autoestados: $|+\rangle$ e $|-\rangle$ são obtidos da rotação de $|\uparrow(R)\rangle$ e $|\downarrow(R)\rangle$, respectivamente. Sob a ação das componentes

do operador σ os autoestados rodados satisfazem as seguintes relações:

$$\sigma_x |\pm\rangle = |\mp\rangle, \quad \sigma_y |\pm\rangle = \pm i |\mp\rangle, \quad \sigma_z |\pm\rangle = \pm |\pm\rangle \quad (17)$$

Supondo $|+\rangle$ e $|-\rangle$ normalizados, e em correspondência com os autovalores E_+ e E_- , obtemos das expressões (14,17) as componentes de $V(R)$

$$V_x \pm = \frac{1}{2R^2} \text{Im}(\langle \pm | \sigma_y | \mp \rangle \langle \mp | \sigma_z | \pm \rangle) = 0$$

$$V_y \pm = \frac{1}{2R^2} \text{Im}(\langle \pm | \sigma_z | \mp \rangle \langle \mp | \sigma_x | \pm \rangle) = 0$$

$$V_z \pm = \pm \frac{1}{2R^2} \text{Im}(\langle \pm | \sigma_x | \mp \rangle \langle \mp | \sigma_y | \pm \rangle) = \pm \frac{1}{2R^2} \quad (18)$$

No espaço de parâmetros, $V_n(R)$ depende do versor radial \hat{r} na seguinte forma:

$$V_+(R) = -V_-(R) = \frac{\hat{r}}{2R^2} \quad (19)$$

A diferença de fase $\gamma_+(\Gamma)$, expressa pela integral de superfície (1.18), (19), permite-nos interpretar $\gamma_+(\Gamma)$ como o fluxo através da área limitada pela curva Γ , do campo magnético de um monopolo de carga $-1/2$, localizado no ponto de degenerescência R^* . O autoestado $|\psi_n(t)\rangle$ de um hamiltoniano, expresso pela matriz hermitiana (12), adquire um fator geométrico γ_n associado ao laço Γ , a saber,

$$\gamma_+(\Gamma) = -\frac{1}{2} \Omega(\Gamma) \quad (20)$$

Quando a superfície S (cujo bordo é uma curva fechada definida no espaço de parâmetros) é deformada, passando pelo ponto de degenerescência, o ângulo sólido sofre uma descontinuidade 4π em seu valor.

I.4 A Formulação Invariante por Transformações Unitárias⁽¹⁾

Consideremos uma partícula de massa m e carga q na presença de um campo eletromagnético dependente do tempo, cuja a equação de Schrödinger para o estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ da partícula é:

$$[\hat{H}(A) + qA_0(r,t)]|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \quad (1)$$

qA_0 corresponde ao potencial escalar do campo dependente do tempo. O hamiltoniano \hat{H} é expresso pelo potencial vetor $A(r,t)$ e por uma energia potencial $V(r)$ que pode ter origem eletrostática, nuclear ou gravitacional:

$$\hat{H}(A) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(p - \frac{i}{\hbar} qA \right)^2 + \hat{V}(r) \quad (2)$$

Para sistemas dependentes do tempo, seu hamiltoniano, em geral, não corresponde à energia. Esta é definida pela soma das energias cinética e potencial (para o caso conservativo). Quando comparada ao hamiltoniano, este pode diferir por um termo que, sugestivamente, denominamos

$$qA_0 = \hat{H} - \hat{E} \quad (3)$$

Supondo que o potencial $V(r)$ seja conservativo, podemos definir o operador energia \hat{E} do sistema por

$$\hat{E} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(p - \frac{i}{\hbar} qA(r,t) \right)^2 + V(r) \quad (4)$$

Quando o estado $|\psi(t)\rangle$ do sistema, expresso na base das autofunções do operador energia \hat{E} (1.4) pelos coeficientes definidos em (1.3), é substituído na equação de Schrödinger (1) e as equações (3) e (1.2) são empregadas, obtemos a equação de movimento para a amplitude de probabilidade $a_n(t)$

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_n - \epsilon_n a_n + \langle \psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0 | \psi_n \rangle a_n = \sum_{m \neq n} \langle \psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0 | \psi_m \rangle a_m \quad (5)$$

Nos sistemas em que o operador energia é o hamiltoniano deles, o termo qA_0 é nulo (equação 3). Nesse caso, a equação (5) é formalmente igual à obtida em (1.5). A expressão (1.10) define uma fase de Berry invariante de gauge para o espaço de parâmetros (1.14). Quando a desejamos invariante de Gauge para o espaço de Hilbert dos estados físicos, definimos:

$$\gamma_n(t) = \int_0^t \langle \psi_n | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - qA_0 \right) \psi_n \rangle dt' \quad (6)$$

Embora qA_0 pareça específico para sistemas em interação com o campo eletromagnético, o essencial é que esse termo representa a diferença entre o hamiltoniano e a energia do sistema em um instante t . Sob uma transformação de gauge, qA_0 assume a forma

$$qA_0'(r,t) = qA_0(r,t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Lambda(r,t) \quad (7)$$

onde $\Lambda(r,t)$ é a função geratriz da transformação. Supomos $\Lambda(r,t)$ univalorada e hermitiana.

A equação de autovalores para operador energia \hat{E} (4)

$$\hat{E} |\psi_n(t)\rangle = \epsilon_n(t) |\psi_n(t)\rangle \quad (8)$$

define o conjunto completo e ortonormal das autofunções e respectivos autovalores: $\{|\psi_n(r,t)\rangle\}$ e $\{\epsilon_n(t)\}$.

Se impusermos que a equação de Schrödinger e a de autovalores para operador energia são invariantes sob transformações unitárias $U(r,t)$ dependentes do espaço e tempo então:

(i) o operador energia \hat{E} assume a forma:

$$\mathcal{E}' = U \mathcal{E} U^\dagger \quad (9)$$

$$\mathcal{E}' = \frac{1}{2m} (p - qA')^2 + V'(r) \quad (9a)$$

(ii) a equação para autovalores do operador \mathcal{E}' é a seguinte:

$$\hat{E}' |\psi_n'(t)\rangle = \epsilon_n(t) |\psi_n'(t)\rangle \quad (10)$$

(11) e as autofunções se transformam em

$$|\psi'_n(t)\rangle = U |\psi_n(t)\rangle \quad (11)$$

O hamiltoniano correspondente a este sistema é assim expresso (1) e

(2):

$$\hat{H}(A, A_0) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(p - \frac{iq}{\hbar} A \right)^2 + V(r) + q A_0 \quad (11a)$$

Quando introduzido na equação de Schrödinger (1) para o estado $|\psi(t)\rangle$ da partícula, obtemos:

$$\hat{H}(A, A_0) |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle$$

Sob transformações unitárias $U(r, t)$, o estado $|\psi(t)\rangle$ assume a forma:

$$|\psi'(t)\rangle = U |\psi(t)\rangle \quad (12)$$

e a equação de Schrödinger transforma-se em:

$$\hat{H}'(A', A'_0) |\psi'(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle \quad (13)$$

A Hamiltoniana H' está relacionada à H por meio de

$$\hat{H}' = U \hat{H} U^\dagger - \frac{i}{\hbar} q U \frac{\partial}{\partial t} U^\dagger \quad (14)$$

$$\hat{H}' = \frac{1}{2m} \left(p - \frac{q}{\hbar} A' \right)^2 + V'(r) + q A'_0 \quad (14a)$$

onde a energia potencial modifica-se da seguinte maneira:

$$V'(r) = U \cdot V(r) \cdot U^\dagger. \quad (15)$$

Em geral, os potenciais transformam-se como

$$A'_\mu = U A_\mu U^\dagger - \frac{i\hbar}{q} U \partial_\mu U^\dagger \quad (16)$$

onde μ assume os valores 0, 1, 2, 3 e as derivadas $\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}$

e $x^\mu = (t, x^1, x^2, x^3)$. Definimos a métrica $g^{\mu\nu}$ na forma diagonal $\text{diag}(1, -1, -1, -1)$.

Comparando a hamiltoniana H (11a) com o operador energia E (4) percebemos que a diferença entre eles é o potencial escalar do campo eletrostático dependente do tempo, sugestivamente indicado na definição (3). O hamiltoniano e a energia se transformam de modo diverso. Esta diferença é expressa por qA_0' (7).

Supomos que uma transformação unitária não altere uma observável física. As diferenças entre os níveis de energia são "observáveis", assim como a fase de Berry. A invariância desta fase sob transformações unitárias é decorrente da invariância do elemento

$$\begin{aligned} \langle \psi_n' | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0' | \psi_n' \rangle &= \langle \psi_n | U^\dagger (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0') U | \psi_n \rangle = \\ &= \langle \psi_n | U^\dagger (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U + i\hbar U \frac{\partial}{\partial t} - qA_0 + i\hbar U (\frac{\partial}{\partial t} U^\dagger) U) | \psi_n \rangle = \\ &= \langle \psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0 | \psi_n \rangle \end{aligned} \quad (17)$$

Como sugerimos em (17) podemos analogamente mostrar que o elemento $\langle \psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0 | \psi_m \rangle$ para $m \neq n$ é invariante. A amplitude de probabilidade $a_n(t)$ definida $a_n(t) \doteq \langle \psi_n | \psi \rangle$ é também invariante sob transformações unitárias, a saber,

$$a_n'(t) = \langle \psi_n' | \psi \rangle = \langle \psi_n | U^\dagger U | \psi \rangle = \langle \psi_n | \psi \rangle = a_n(t) \quad (18)$$

A equação de movimento para essas amplitudes (5), mantém-se formalmente invariante, devido às considerações anteriores (17) e (18). A equação de movimento para as amplitudes transformadas resulta em

$$\begin{aligned} i \frac{da_n'}{dt} - \epsilon_n a_n' + \langle \psi_n' | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0' | \psi_n' \rangle a_n' &= \\ - \sum_{l \neq n} \langle \psi_n' | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0' | \psi_l' \rangle a_l' & \end{aligned} \quad (19)$$

onde $|\psi_n'\rangle$ é dado em (11) e qA_0 em (16). Na representação de interação, definimos amplitudes $\tilde{a}_n(t)$ em função de grandezas invariantes, a saber,

$$\tilde{a}_n(t) = a_n(t) e^{i \int_0^t \epsilon_n(t') dt' - i \gamma_n(t)} \quad (20)$$

$\tilde{a}_n(t)$ satisfazem a equação de movimento

$$i \frac{d}{dt} \tilde{a}_n(t) = - \sum_{l \neq n} \langle \psi_n | (i \hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0) | \psi_l \rangle \tilde{a}_l(t) \times \exp \left\{ -i \int_0^t [\epsilon_l(t') - \epsilon_n(t')] dt' + i [\gamma_l(t) - \gamma_n(t)] \right\} \quad (21)$$

Esta foi obtida substituindo a definição (20) nas equações de movimento (5). Mantendo a invariância formal da equação (21), podemos reescrever seus elementos de matriz em termos do operador potência

$$\langle \psi_n | i \hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0 | \psi_l \rangle = -i \hbar \frac{\langle \psi_n | \hat{P} | \psi_l \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_l} \quad (22)$$

O operador potência é definido (em geral) como [Apêndice 1]:

$$\hat{P} = \hbar \left[\frac{\partial}{\partial t} + i q A_0, \hat{E}(t) \right]$$

ou

$$\frac{d}{dt} \langle \psi_n | \hat{E} | \psi_m \rangle = \langle \psi_n | \hat{P} | \psi_m \rangle \quad (23)$$

Assim, as amplitudes de probabilidade $\tilde{a}_n(t)$ na representação de interação satisfazem a equação invariante:

$$i \frac{d}{dt} \tilde{a}_n(t) = \sum_{l \neq n} i \frac{\langle \psi_n | \hat{P} | \psi_l \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_l} \tilde{a}_l(t) \times \exp \left\{ -i \int_0^t [\epsilon_l(t') - \epsilon_n(t')] dt' + i [-\gamma_n(t) + \gamma_l(t)] \right\} \quad (24)$$

Esta é obtida introduzindo o elemento (22) na equação de movimento (21).

Gostaríamos de destacar que, sob transformações unitárias, a energia (ou a diferença entre os níveis de energia) e a fase de Berry são separadamente invariantes, visto se tratar de grandezas "observáveis".

Agora estamos em condições de demonstrar que a fase de Berry, definida em (6), é invariante por transformações de gauge. Consideremos a transformação unitária $U(r,t)$ dependente do espaço e tempo, a qual assume a forma

$$U(r,t) = e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda(r,t)} \quad (25)$$

onde $\Lambda(r,t)$ é uma função univalorada e hermitiana, denominada função geratriz da transformação. Se, sob a ação de $U(r,t)$ as autofunções $|\psi_n(t)\rangle$ do operador energia \hat{E} se transformam como em (11) e o potencial qA_0 (3) da maneira descrita em (16), então obtemos a fase de Berry (6) invariante por transformações de gauge

$$\begin{aligned} \langle \psi'_n(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0' | \psi'_n(t) \rangle &= \langle \psi_n(t) | e^{-\frac{i}{\hbar} q \Lambda} (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0') e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda} | \psi_n(t) \rangle \\ &= \langle \psi_n(t) | e^{-\frac{i}{\hbar} q \Lambda} \left[i\hbar e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda} \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda} \frac{\partial}{\partial t} (e^{-\frac{i}{\hbar} q \Lambda}) + q \frac{\partial \Lambda}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda} - qA_0' e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda} \right] | \psi_n(t) \rangle \\ &= \langle \psi_n(t) | e^{-\frac{i}{\hbar} q \Lambda} \left[i\hbar e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda} \frac{\partial}{\partial t} - qA_0' e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda} \right] | \psi_n(t) \rangle \\ &= \langle \psi_n(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0' | \psi_n(t) \rangle \end{aligned} \quad (26)$$

Recentemente^[14,15] cogitou-se na possibilidade de se remover a fase de Berry por transformações unitárias. Denominamos fase total a soma da fase dinâmica com a de Berry. Sob essas transformações, cogitava-se em que a fase total permaneceria inalterada. Essa inalterabilidade decorre do seguinte: a fase dinâmica se modifica compensando a remoção da fase de Berry. No entanto, sob

nosso ponto de vista, se transformações unitárias não devem alterar qualquer grandeza observável, é surpreendente que a fase de Berry e a energia (ou a diferença de energia) possam se modificar.

Em sistemas dependentes do tempo, a hamiltoniana não é necessariamente a energia ^[26]. Nós a obtemos das equações de movimento, com a característica de sua variação no tempo ser a potência trocada pelo sistema.

O problema consiste agora em determinar a energia do sistema, pois argumentamos que nossa formulação propõe a invariância por transformações unitárias da fase de Berry e da energia, separadamente. O fato de assumir que o hamiltoniano é a energia em problemas dependentes do tempo (sem primeiro obtê-la das equações de movimento), leva-nos a um operador energia, dependente do gauge escolhido, assim como a fase de Berry.

A seguir, mostraremos que no limite adiabático a expansão perturbativa da fase total dependente do gauge escolhido coincide com a fase total invariante. Esta é calculada quando se determina a energia do sistema e se emprega a definição invariante da fase de Berry.

Suponhamos que a hamiltoniana dependente do tempo H é a energia do sistema. A equação de autovalores para o operador energia expressa-se da seguinte maneira:

$$\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \quad (27)$$

onde $\{|\phi_n\rangle\}$ são autoestados e $\{E_n\}$ as autoenergias correspondentes. A fase total $\tilde{\Phi}_n$ (dependente do Gauge) é a soma da fase dinâmica

com a de Berry (ambas dependentes do gauge), a saber,

$$\tilde{\Phi}_n = - \int_0^t E_n(t') dt' + \int_0^t dt' \langle \phi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \phi_n \rangle \quad (28)$$

A fase total $\tilde{\Phi}_n$ invariante é obtida usando a de Berry (6), os autovalores E_n e autovetores $|\psi_n\rangle$ correspondentes ao operador energia \hat{E} . Dentro deste formalismo deve-se ter o cuidado de caracterizar o operador \hat{E} como a energia do sistema (que, a priori, pode ser diferente do hamiltoniano). Esta fase é assim expressa

$$\tilde{\Phi}_n = - \int_0^t E_n(t') dt' + \int_0^t \langle \psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - qA_0 | \psi_n \rangle dt' \quad (29)$$

Assumamos que o hamiltoniano \hat{H} do sistema seja expressa como a soma de um termo \hat{H}_0 e uma perturbação V :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V_0 \quad (30)$$

Se escolhermos o termo \hat{H}_0 como o operador energia \hat{E} do sistema, a perturbação V corresponderá ao termo qA_0 (3). Para esta escolha, as autoenergias E_n e os correspondentes autoestados $|\psi_n\rangle$ do operador \hat{E} satisfazem a equação de autovalores para o operador \hat{H}_0 , isto é

$$H_0 |\phi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n^{(0)}\rangle, \quad |\psi_n\rangle = |\phi_n^{(0)}\rangle, \quad E_n = E_n^{(0)} \quad (31)$$

A expansão perturbativa dos autovalores E_n do hamiltoniano \hat{H} (27), em ordens mais baixas, é a seguinte:

$$E_n = E_n + \langle \psi_n | qA_0 | \psi_n \rangle + \dots \quad (32)$$

e a expansão da fase de Berry (6)

$$\tilde{\Phi}_n = \int_0^t \langle \psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \psi_n \rangle dt' + \dots \quad (33)$$

A fase total (28) pode ser expressa em função de (32) e (33), a saber,

$$\tilde{\Phi}_n = - \int_0^t \left\{ E_n(t') + \langle \psi_n(t') | g A_0 | \psi_n(t') \rangle + \dots \right\} dt' + \int_0^t \left\{ \langle \psi_n(t') | i \hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \psi_n(t') \rangle + \dots \right\} dt' \quad (34)$$

Quando comparamos esta com a fase total invariante de gauge Φ_n (29), notamos que a fase invariante corresponde à soma da fase dinâmica $\int_0^t E_n(t') dt'$, calculada até primeira ordem na expansão (32), com a de Berry $\int_0^t \langle \phi_n^{(0)} | i \hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \phi_n^{(0)} \rangle dt'$, calculada até ordem zero na expansão (33).

Consequentemente, $\tilde{\Phi}_n = \Phi_n +$ termos de ordem mais elevada na expansão. Isto corresponde, no limite adiabático, ao resultado conjecturado $\tilde{\Phi}_n = \Phi_n$. Em geral, as duas fases não devem ser iguais.

II. MANIFESTAÇÕES DA FASE DE BERRY

II.1 Efeito Aharonov - Bohm

Há cerca de três décadas, Aharonov e Bohm⁽⁹⁹⁾ originaram uma série de debates e controvérsias na comunidade científica, que continuam até os dias presentes. Sugeriram uma experiência de difração de elétrons e calcularam a seção de choque para o espalhamento de elétrons por uma linha infinita e impenetrável de fluxo magnético. Assim que obtiveram uma seção de choque diferencial não nula, interpretaram que o espalhamento e a figura de difração eram causados pelo potencial vetor, definido na região livre da influência do campo magnético. Propuseram que na formulação quântica, os potenciais eletromagnéticos podem ter consequências observáveis. Portanto, representam mais que artifícios introduzidos para simplificar as soluções das equações de Maxwell. Aharonov e Bohm sugeriram que "in quantum mechanics the fundamental entities are the potentials, while the fields are derived from them by differentiations".

Classicamente as equações de movimento de uma partícula de massa \underline{m} e carga \underline{e} , num campo eletromagnético, são dadas em termos da força de Lorentz:

$$m \frac{d^2 x^\mu}{d\tau^2} = e F^{\mu\nu} \frac{dx_\nu}{d\tau} \quad (1)$$

onde τ é o tempo próprio da partícula, $x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3)$,

$x_\nu = (x^0, -x^1, -x^2, -x^3)$. O tensor campo eletromagnético $F^{\mu\nu}$:

$$(F^{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 0 & -E^1 & -E^2 & -E^3 \\ E^1 & 0 & -B^3 & B^2 \\ E^2 & B^3 & 0 & -B^1 \\ E^3 & -B^2 & B^1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

está relacionado aos potenciais $A^\mu = (A_0, \mathbf{A})$, A_0 o potencial escalar, \mathbf{A} o potencial vetor, a saber,

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \quad (3)$$

Estes potenciais não são univocamente determinados por (3), pois sob uma transformação de gauge:

$$A^\mu \rightarrow A^\mu + \frac{1}{e} \partial^\mu \Lambda(x^\mu) \quad (4)$$

os campos mantêm-se invariantes:

$$F^{\mu\nu} \rightarrow F^{\mu\nu} + (\partial^\mu \partial^\nu - \partial^\nu \partial^\mu) \Lambda(x^\mu) = F^{\mu\nu} \quad (5)$$

Neste contexto, é natural interpretar fisicamente a força de Lorentz em termos da interação da partícula com os campos \mathbf{E} e \mathbf{B} . Essa interação ocorre em regiões em que \mathbf{E} e/ou \mathbf{B} não são nulos.

A experiência⁽²⁰⁾, proposta por Aharonov e Bohm consiste na difração de elétrons através de duas fendas, dispostas de maneira que um solenóide muito longo e de pequeno raio esteja entre elas. A situação é idealizada, tal que o raio do solenóide tende a zero, enquanto o campo magnético confinado \mathbf{B} tende a ∞ , resultando em um fluxo constante através de secções do solenóide. Devido ao caráter ondulatório dos elétrons, não detectamos por qual fenda eles passam, mas observamos um padrão de interferência característico. A corrente que passa pelo solenóide infinito gera um campo magnético confinado \mathbf{B} . Assim os elétrons e detectores se encontram em regiões livres da interação magnética. A seguir, descreveremos o campo \mathbf{B} em coordenadas cilíndricas (r, φ, z) . Escolheremos o campo confinado ao interior do solenóide e paralelo a seu eixo (direção Oz), a saber,

$$\begin{aligned} \text{interior } (r < R) \quad B_r = B_\varphi = 0 \quad B_z = B \\ \text{exterior } (r > R): \quad B = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

R: raio do solenóide

Um potencial vetor A , que descreve este campo solenoidal confinado, é o seguinte:

$$\begin{aligned} \text{interior } (r < R): \quad A_r = A_z = 0 \quad A_\varphi = \frac{B}{2} r \\ \text{exterior } (r > R): \quad A_r = A_z = 0 \quad A_\varphi = \frac{BR}{2r} \end{aligned} \quad (7)$$

tal que $B_z(r) = \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r A_\varphi) - \frac{\partial}{\partial \varphi} A_r \right]$ é zero para $r > R$.

Primeiramente, vamos estudar o padrão de difração de 2 fendas na ausência de campo magnético, ou seja, o caso em que não há corrente passando pelo solenóide.

Um elétron propaga-se da origem $x_0 = (x=0, y=0)$ a um ponto $x_{F\pm} (x = x_{F\pm}, y = y_{F\pm})$ no intervalo de tempo: t_F com velocidade v , cuja componente: v_y é constante. Continua a se propagar livremente para um ponto x_c na tela, localizado em $(x = x_c, y = y_c)$ no intervalo de tempo $t_c - t_F$. A intensidade do padrão de difração, que é observado na tela, é dada em termos da função de onda $\Psi(x)$ do elétron. Pelo princípio de superposição, $\Psi(x_c)$ é a soma da função de onda do elétron $\Psi_+(x_c)$ que passa através da fenda em x_{F+} e da função de onda $\Psi_-(x_c)$ do elétron que passa através da fenda x_{F-} .

$$\Psi(x_c) = \Psi_+(x_c) + \Psi_-(x_c) \quad (8)$$

Para os efeitos de interferência serem significativos, é necessário que a distância x_c ao longo da tela seja muito menor que a distância L na direção OY entre as fendas e a tela:

$$L = y_c - y_{F\pm} = v_y (t_c - t_F) \quad . \text{ Representamos por } \underline{a} \text{ a}$$

diferença entre os percursos do elétron, relacionados às diferentes fendas. A diferença de fase $\delta^{(0)}$ entre as funções de onda: $\psi_+(x_c)$ e $\psi_-(x_c)$ é dada pela razão entre a e o momentum $p = \frac{h}{\lambda}$, onde λ é o comprimento de onda do elétron:

$$\delta^{(0)} = \frac{2\pi a}{\lambda} \quad (9)$$

Os efeitos de interferência podem ser apreciados, como dissemos anteriormente, para $x_c \ll L$. Nessas condições expressamos a em função de $d = 2x_{f+}$, a distância entre as fendas, a saber

$$a \cong \frac{1}{L} x_c d \quad (10)$$

A diferença de fase $\delta^{(0)}$ (9) pode ser reescrita em termos de:

$$\delta^{(0)} \cong 2\pi \frac{x_c \cdot d}{\lambda \cdot L} \quad (11)$$

A intensidade do padrão de difração na tela é proporcional a:

$$I(x_c) = e^{-x_c^2} \cdot \cos\left(\frac{\delta^{(0)}}{2}\right) \quad (12)$$

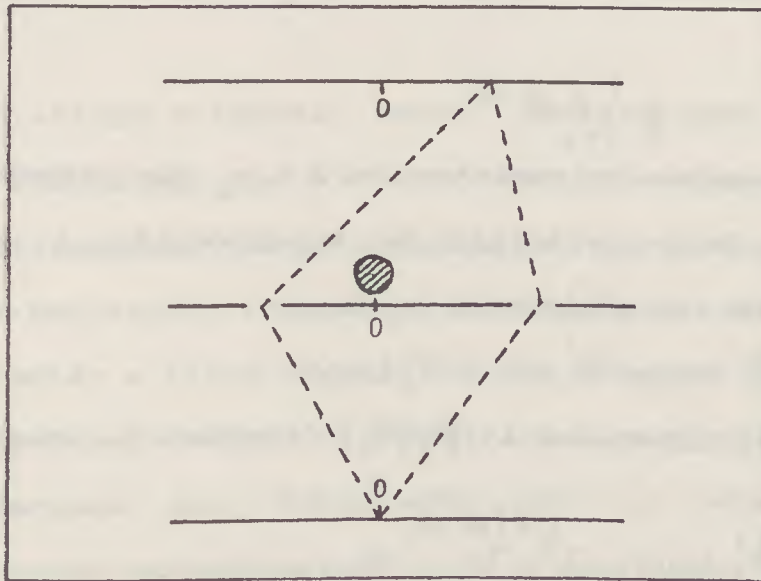


fig. II

Consideremos a difração dos elétrons na presença de um campo magnético confinado ao interior do solenóide. O potencial vetor A está definido em todo o espaço (7) e o hamiltoniano para o elétron é expresso por este potencial vetor

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (p - eA)^2 \quad (13)$$

A função de onda $|\psi\rangle$ do elétron livre de interação é

$$|\psi\rangle = |\psi\rangle e^{\frac{i}{\hbar} p r} \doteq |\psi\rangle e^{i\alpha} \quad (14)$$

onde p é o momentum da partícula. Na presença do campo eletromagnético, o momentum canônico P é definido como: $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}}$. \mathcal{L} é a lagrangeana do sistema. P não representa mais o momento cinético p , mas $p - eA$. As fases das funções de onda ψ_+ e ψ_- modificam-se de acordo com

$$\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= |\psi_+\rangle e^{i\alpha_+} & |\psi_-\rangle &= |\psi_-\rangle e^{i\alpha_-} \\ \alpha_+ &\rightarrow \alpha_+ - \frac{e}{\hbar} A \cdot r & \alpha_- &\rightarrow \alpha_- - \frac{e}{\hbar} A \cdot r \end{aligned} \quad (15)$$

A mudança de fase sobre a trajetória C_{\pm} é:

$$\Delta\alpha_{\pm} = -\frac{e}{\hbar} \int_{C_{\pm}} A \cdot dr \quad (16)$$

$C_{\pm}(0, x_c)$ representam os caminhos de 0 a x_c que passam através da fenda em $x_{F\pm}$. Pelo princípio de superposição, a amplitude de probabilidade para o elétron em x_c é:

$$\psi'(x_c) = \psi'_+(x_c) + \psi'_-(x_c) \quad (17)$$

$\psi'_{\pm}(x_c)$ estão relacionados a $\psi_{\pm}(x_c)$ (funções de onda do elétron livre) por:

$$\psi'_{\pm}(x_c) = e^{\frac{i}{\hbar} e \int_{C_{\pm}} A \cdot dr} \cdot \psi_{\pm}(x_c) \quad (18)$$

A diferença de fase δ entre as funções de onda $\psi'_+(x_c) = \psi'_-(x_c)$ é expressa por $\delta^{(0)}$ e pelo fluxo Φ :

$$\begin{aligned} \delta &= \delta^{(0)} + \Delta\alpha_+ - \Delta\alpha_- = \delta^{(0)} + \frac{e}{\hbar} \oint_C A \cdot dr \\ &= \delta^{(0)} + \frac{e}{\hbar} \int_S (\nabla \wedge A) \cdot dS = \delta^{(0)} + \frac{e}{\hbar} \int_S B \cdot dS \\ &= \delta^{(0)} + \frac{e}{\hbar} \Phi \end{aligned} \quad (19)$$

C é o caminho fechado $C_+ - C_- = \partial S$, bordo da superfície S e Φ representa o fluxo magnético através de uma secção do solenóide.

Empregamos em (19) o teorema de Stokes (t.S) para obter a integral de superfície: $\int_S B \cdot dS$.

Como dissemos anteriormente, o efeito (A.B) pode ser interpretado nos seguintes termos: na teoria quântica, os potenciais apresentam "manifestações" físicas em partículas que se encontram em regiões livres da influência dos campos. Por outro lado, percebemos da expressão (19) que os efeitos físicos dependem do $\nabla \wedge A$, ou seja, o elétron sofre a influência de campos não nulos em regiões inacessíveis a ele - não localidade da integral $\oint_C A \cdot dr$.

Em seu artigo original, Berry⁽²⁾ mostrou que a fase geométrica estava relacionada com o efeito Aharonov-Bohm (A.B), de certo modo generalizando-o. Berry considerou partículas carregadas no interior de uma caixa, rodada por um ângulo de 2π em relação ao eixo, que contém o fluxo magnético. Ele concluiu que os estados do sistema adquirem a fase geométrica, proporcional ao fluxo.

Consideremos sua formulação para o efeito (A.B). Vamos admitir um campo magnético confinado a uma linha, cujo fluxo denotaremos por Φ . Um ponto à distância R da linha de fluxo

não sente a influência do campo. Porém, o potencial vetor $A(R)$, deve satisfazer a seguinte condição:

$$\oint_C A(R) \cdot dR = \Phi \quad (20)$$

em que C representa um laço em torno da linha de fluxo. Seja um sistema quântico constituído de partículas carregadas no interior de uma caixa, cuja posição é dada pelo vetor R . O sistema, situado a uma distância R da linha de fluxo, não é atravessado por linhas de campo magnético.

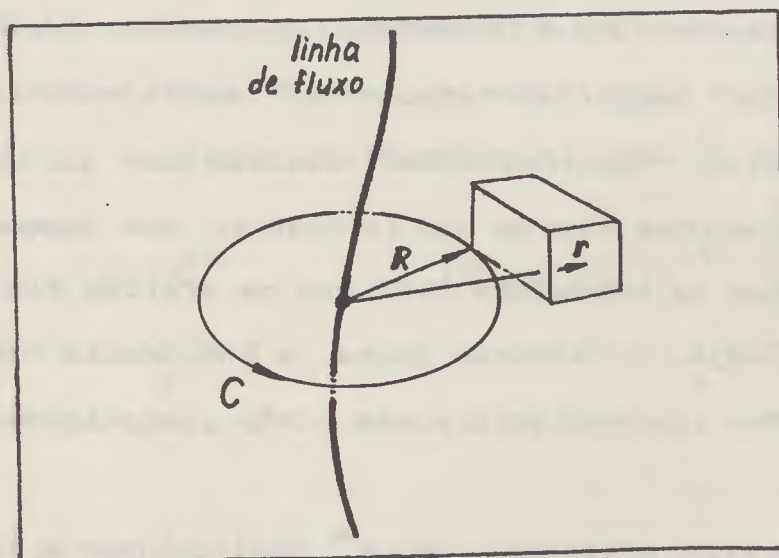


fig.III

Na ausência de fluxo magnético, o vetor potencial é nulo. Nesse caso o hamiltoniano de uma partícula confinada depende do vetor posição r (ou da diferença $r - R$) e do momento conjugado \hat{p} :

$$\hat{H} = H(\hat{p}, r - R). \quad (21)$$

Os autoestados do operador energia $\hat{E} = \hat{H}$ dependem apenas do vetor posição: $|\Psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})\rangle$. Os níveis de energia E_n devem ser independentes de \mathbf{R} (posição da caixa).

Para fluxo não-nulo, o hamiltoniano de uma partícula confinada depende do vetor posição $\mathbf{r}-\mathbf{R}$ e do momentum conjugado $\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r})$:

$$\hat{H} = H(\mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}); \mathbf{r} - \mathbf{R}) \quad (22)$$

Os autoestados do operador energia $\hat{E} = \hat{H}$ para partículas $|\Psi_n(\mathbf{R})\rangle$ ou melhor dizendo, as projeções $\langle \mathbf{r} | \Psi_n \rangle$, podem ser relacionadas com $|\Psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})\rangle$ pelo fator de fase de Dirac:

$$\langle \mathbf{r} | \Psi_n(\mathbf{R}) \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \int_{\mathbf{R}}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'} |\Psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})\rangle \quad (23)$$

Sendo a energia potencial do sistema independente do tempo e o fator de fase de Dirac a única contribuição adquirida pelos autoestados, conclui-se que os níveis de energia E_n mantêm-se inalterados.

Suponhamos agora a caixa transportada ao longo da curva C , que circunda a linha de fluxo sem interceptá-la. Neste caso, não é necessário que o transporte seja adiabático. Após completar o circuito, um autoestado $|\Psi_n(\mathbf{R})\rangle$ adquirirá uma fase independente de gauge (I.1.10), que obtemos usando o produto (23):

$$\begin{aligned} \gamma_n(\Gamma) &= \oint_C \langle \Psi_n(\mathbf{R}) | i \nabla_{\mathbf{R}} | \Psi_n(\mathbf{R}) \rangle d\mathbf{R} = \\ &= i \oint_C d\mathbf{R} \int d\mathbf{r} \left\{ \Psi_n^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \left(-\frac{i}{\hbar} e \right) \mathbf{A}(\mathbf{r}) \Psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R}) + \Psi_n^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \nabla_{\mathbf{R}} \Psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \right\} \quad (24) \end{aligned}$$

Supondo $|\Psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})\rangle$ normalizada, o termo $\int d\mathbf{r} \left\{ \Psi_n^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \nabla_{\mathbf{R}} \Psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \right\}$ é nulo, pois $|\Psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})\rangle$ é real no interior da caixa. A fase de Berry

fica relacionada ao fluxo (20) na seguinte forma:

$$\gamma_n(\Gamma) = i \oint_C dR \cdot \left(-\frac{i e}{\hbar} \right) A(R) = \frac{e}{\hbar} \Phi \quad (25)$$

Note-se que, para este fenômeno, $A(R)$ é uma grandeza definida no espaço-tempo, correspondendo ao potencial vetor. A fase $\gamma_n(\Gamma)$ é independente do número quântico n , da forma do circuito C ao redor da linha de fluxo e do modo como é percorrido esse circuito. O efeito A.B. ilustra que $\gamma_n(\Gamma)$ pode ser não nula até mesmo se o circuito C não envolve deformações isospectrais de $\hat{H}(R)$ (Não é necessária a presença de degenerescência no espectro do hamiltoniano para que o fator de fase geométrico não seja nulo). Berry propôs que este fator poderia ser observado pela interferência dos autoestados das partículas transportadas na caixa e de outras em uma caixa fixa.

II.2 A aproximação Born-Oppenheimer (B.O.)

A aproximação Born-Oppenheimer foi primeiramente formulada no contexto da Física Molecular, mas aplica-se a sistemas que apresentam duas escalas de energia bem distintas entre si. Na aplicação à Física Molecular, a separação nas escalas de energia refere-se de um lado ao espaçamento entre os níveis de energia eletrônicos, e de outro, ao espaçamento entre os níveis associados com vibrações e rotações dos graus de liberdade nuclear (que não envolvem mudanças nos orbitais eletrônicos). Os sistemas

moleculares apresentam uma característica simplificadora: sendo a massa dos elétrons muito menor que a dos núcleos (da ordem de 10^{-3} a 10^{-5} vezes menor) e sujeitos (elétrons e núcleos) a forças de intensidade comparável, o movimento dos elétrons é muito mais rápido que o dos núcleos. Estes distintos movimentos podem ser analisados separadamente. Na aproximação B.O. resolvemos os estados eletrônicos para núcleos fixos. Logo, estes estados devem apresentar dependência paramétrica nas variáveis nucleares. Devido à aproximação adiabática, para excitações de baixa energia, esperamos que os estados eletrônicos sejam aproximadamente estacionários, durante o movimento lento dos núcleos. A equação de Schrödinger para o sistema

$$(T_{\text{Nucl}} + T_{\text{el.}} + V) \Psi = E \Psi \quad (1)$$

compõe-se de: energia cinética nuclear T_{nuc} e eletrônica T_{el} , o potencial $V(r, R)$ de interação dos elétrons e núcleos, e as coordenada eletrônica r e nuclear R . O potencial de interação entre os núcleos depende da distância que os separa. Para o caso da molécula, este potencial corresponde a um mínimo para determinadas distâncias internucleares, o qual equivale à configuração de equilíbrio. Os núcleos efetuam pequenas oscilações em torno destas configurações de equilíbrio. Podemos observar também rotações e translações do conjunto dos núcleos. Born e Oppenheimer^[9] observaram que a razão entre o "gap" de energia dos estados eletrônicos e o "gap" dos níveis de energia de rotação e vibração dos núcleos é expressa por um fator da ordem de $(M/m)^{1/4}$ (M e m são as massas do núcleo e do elétron, respectivamente).

Quando estudamos o espectro de excitações de baixa energia da molécula, a descrição do sistema envolve somente os graus de liberdade nucleares. Nesse caso, as excitações com energia são menores que o "gap" dos níveis eletrônicos. É nesse sentido, que os estados eletrônicos são considerados estacionários (ausência de transições). Transições entre estados, cuja diferença dos níveis de energia é grande na escala molecular, envolvem mudanças proporcionalmente grandes na frequência. As variáveis eletrônicas, quando associadas a estas mudanças, são denominadas "rápidas". Tradicionalmente, a formulação da aproximação B.O. em termos de variáveis "rápidas" e "lentas", está relacionada com as diferenças das frequências associadas ao movimento eletrônico e nuclear. Os elétrons movem-se com uma frequência associada muito superior à de vibração dos núcleos em torno de suas posições de equilíbrio. Consideramos a frequência do movimento de rotação da molécula muito menor que a de vibração. Nesse sentido, denominamos graus de liberdade nucleares - variáveis "lentas".

O estado Ψ do sistema pode ser decomposto em uma componente nuclear $\Phi(R_j)$ e outra, eletrônica $\phi(r_i, R_j)$:

$$\Psi(R_j, r_i) = \Phi(R_j) \phi(r_i, R_j) \quad (2)$$

Os índices i e j rotulam o i -ésimo elétron de massa m o j -ésimo núcleo de massa M_j , respectivamente. Na aproximação B.O. ^[40] cada configuração dos núcleos indexados por j , corresponde à uma distribuição eletrônica $|\phi(r_i, R_j)|^2$ com energia $U(R_j)$.

Os estados $\phi(r_i, R_j)$ satisfazem a equação

$$[T_e + V(r_i, R_j)] \phi(r_i, R_j) = U(R_j) \phi(r_i, R_j) \quad (3)$$

onde ignoramos T_{nuc} .

O operador energia cinética eletrônica é definido:

$$T_{el} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \nabla_{r_i}^2 \quad \text{em função da massa } m \text{ do elétron. Denotaremos: } r_i \text{ por } i \text{ e } R_j \text{ por } j. \text{ Assim, reescrevemos: } T_{el} = \sum_{i=1}^n \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right) \quad \text{e a equação de Schrödinger, independente do tempo, para os estados eletrônicos } \phi(r_i, R_j) \doteq \phi_i^{(j)} \quad (3)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 + V_{i,j} \right] \phi_i^{(j)} = U_j \phi_i^{(j)} \quad (4)$$

Introduzindo a representação do operador energia cinética nuclear

$$T_{nuc} = \sum_{j=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2M_j} \nabla_j^2 \right) \quad \text{e do operador energia cinética eletrônica } T_{el} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 \quad \text{podemos reescrever a equação do estado } \Psi_{i,j}(1) \text{ sob a seguinte forma:}$$

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^N \frac{1}{M_j} \nabla_j^2 \right) + V_{i,j} - E \right] \Psi_{i,j} = 0 \quad (5)$$

Introduzindo (2) em (5), obtemos:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Phi_j \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 \phi_i^{(j)} \right) + \Phi_j V_{i,j} \phi_i^{(j)} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^N \frac{1}{M_j} \nabla_j^2 \Phi_j \phi_i^{(j)} - E \Phi_j \phi_i^{(j)} = 0 \quad (6)$$

Comparando as expressões (4) e (6), percebemos que a equação de Schrödinger (5) contém a energia eletrônica U_j :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^N \phi_i^{(j)} \frac{1}{M_j} \nabla_j^2 \Phi_j \right) + (U_j - E) \phi_i^{(j)} \Phi_j + \left(-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^N \frac{1}{M_j} \left[\Phi_j \nabla_j^2 \phi_i^{(j)} + 2 (\nabla_j \Phi_j) (\nabla_j \phi_i^{(j)}) \right] \right) = 0 \quad (7)$$

Na aproximação B.O., consideremos a projeção de (7) sobre $\phi(r_i, R_j)$. Ela pressupõe os estados eletrônicos "congelados", estacionários em relação ao movimento lento dos núcleos. Assim,

obtemos uma descrição efetiva do movimento nuclear sem referência aos estados eletrônicos. No entanto, o hamiltoniano nuclear efetivo contém um termo potencial (relativo à contribuição dos níveis de energia eletrônica) e um potencial de gauge "de fundo" Λ (9). Multiplicando (7) por $\Phi_i^{*(j)}$, integrando nas variáveis eletrônicas, e supondo os estados eletrônicos normalizados

$$\int dr_i \Phi_i^{*(j)} \Phi_i^{(j)} = 1, \text{ obtemos:}$$

$$\left[\left(\sum_{j=1}^N \frac{-\hbar^2}{2M_j} \nabla_j^2 \right) + U_j \right] \Phi_j + \sum_{j=1}^N \frac{-\hbar^2}{2M_j} \left(\Phi_j \int \Phi_i^{*(j)} \nabla_j^2 \Phi_i^{(j)} dr_i + 2 \nabla_j \Phi_j \cdot \int \Phi_i^{*(j)} \nabla_j \Phi_i^{(j)} dr_i \right) = E \Phi_j \quad (8)$$

Denotaremos as integrais $\int \Phi_i^{*(j)} \nabla_j \Phi_i^{(j)} dr_i = \int \Phi_i^{*(j)} \nabla_j^2 \Phi_i^{(j)} dr_i$

por

$$-i\Lambda \equiv \int \Phi_i^{*(j)} \nabla_j \Phi_i^{(j)} dr_i = \langle \Phi_i^{(j)} | \nabla_j \Phi_i^{(j)} \rangle \quad (9)$$

e

$$W_j = \int \Phi_i^{*(j)} \nabla_j^2 \Phi_i^{(j)} dr_i = \langle \Phi_i^{(j)} | \nabla_j^2 \Phi_i^{(j)} \rangle \quad (10)$$

onde introduzimos a notação de Dirac. O hamiltoniano nuclear efetivo, na aproximação B.O. (para níveis de energia eletrônicos não degenerados) é simplesmente:

$$H_{\text{EFF}}^{\text{B.O.}} = - \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_j} \left[\nabla_j^2 + W_j - 2i \nabla_j \Phi_j \Lambda \right] + U_j \quad (11)$$

Acreditava-se que as fases dos estados eletrônicos $\phi(r_i, R_j)$, poderiam ser escolhidas globalmente para cada R_j , de modo a tornar reais os estados das variáveis "rápidas". Se $\phi(r_i, R_j)$ é real e normalizada, logo: $\nabla_j \int \phi_i^{(j)} \phi_i^{(j)} dr_i = 2 \int \phi_i^{(j)} \nabla_j \phi_i^{(j)} dr_i = 0$ e $\int \phi_i^{(j)} \nabla_j^2 \phi_i^{(j)} dr_i = - \int (\nabla_j \phi_i^{(j)})^2 dr_i + \frac{1}{2} \nabla_j^2 \int (\phi_i^{(j)})^2 dr_i$. Empregando os seguintes resultados: $\Lambda=0$ e $W_i = - \int (\nabla_j \phi_i^{(j)})^2 dr_i$, reescre-

vemos o hamiltoniano efetivo nuclear (11) para estados eletrônicos reais:

$$H_{\text{EFF}}^{\text{B.O.}} = - \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_j} (\nabla_j^2 - \int (\nabla_j \phi_i^{(j)})^2 dr_i) + U_j \quad (12)$$

Berry mostrou que esta escolha para os autoestados das variáveis rápidas $\phi_i^{(j)}$ não era possível para todas as fases. O efeito da redefinição de fase de $\phi_i^{(j)}$ é modificar os autoestados das variáveis lentas, a saber,

$$\begin{aligned} \phi_i^{(j)} &\longrightarrow e^{i\Lambda(R)} \phi_i^{(j)} \\ \Phi_j &\longrightarrow e^{-i\Lambda(R)} \Phi_j \end{aligned} \quad (13)$$

tal que o estado do sistema $\Psi_{i,j}$ (2) se mantém invariante.

A conexão de Berry $-iA$ (9) é somente uma primeira correção a aproximação B.O. A seguir, vamos obter hamiltonianos efetivos para sistemas moleculares com autoestados degenerados e hamiltonianos que contenham a contribuição das transições entre autoestados eletrônicos. Seguiremos a formulação de Moody, Shapere e Wilczek [1].

O estado Ψ^r do sistema (1) é expresso como combinação dos autoestados nucleares Φ_n e eletrônicos $\phi_n(r, R)$, em que o índice n rotula o n -ésimo autoestado eletrônico. Para uma determinada configuração nuclear R , o autoestado $\phi_n(r, R)$ da variável rápida satisfaz a equação de autovalores:

$$\hat{E}_{el} \phi_n(r, R) = [\hat{T}_{el} + V(r, R)] \phi_n(r, R) = E_n(R) \phi_n(r, R) \quad (14)$$

Recordemos as definições dos operadores energia cinética nuclear

T_{nuc} e energia cinética eletrônica T_{el} na representação $|r\rangle, |R\rangle$:

$$T_{\text{NUC}} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \quad \text{e} \quad T_{\text{el}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 \quad . \quad \text{Introduzindo estas definições}$$

ções em (1) e (14), e, posteriormente, comparando estas equações, reescrevemos a equação de Schrödinger (1)

$$\sum_n \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 + \epsilon_n \right] \bar{\Phi}_n(R) \phi_n(r, R) = E \sum_n \bar{\Phi}_n(R) \phi_n(r, R) \quad (15)$$

Projetando (15) num autoestado $\phi_m(r, R)$, obtemos uma equação efetiva para variáveis "lentas":

$$\sum_n \langle \phi_m | -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \bar{\Phi}_n | \phi_n \rangle + \epsilon_m(R) \bar{\Phi}_m = E \bar{\Phi}_m \quad (16)$$

Introduzimos em (16) a notação de Dirac para os autoestados eletrônicos normalizados. Recordemos a ação do operador T_{nuc} . Ele atua nos autoestados nuclear $\bar{\Phi}_n(R)$ e eletrônicos $\phi_n(r, R)$. Logo, o termo relativo à energia cinética nucleares em (16) pode ser desenvolvido como

$$\langle \phi_m | +\nabla_R^2 \bar{\Phi}_n | \phi_n \rangle = +(\delta_{mn} \nabla_R^2 + 2 \langle \phi_m | \nabla_R \phi_n \rangle \cdot \nabla_R + \langle \phi_m | \nabla_R^2 \phi_n \rangle) \bar{\Phi}_n \quad (17)$$

Introduzindo o "potencial de Gauge"

$$A_{mn} = i \langle \phi_m | \nabla_R \phi_n \rangle \quad (18)$$

reescrevemos (17) sob a seguinte forma:

$$\langle \phi_m | +\nabla_R^2 \bar{\Phi}_n | \phi_n \rangle = +(\delta_{mn} \nabla_R^2 + 2 \langle \phi_m | \frac{i}{2} \nabla_R^2 \phi_n \rangle - 2i A_{mn} \cdot \nabla_R) \bar{\Phi}_n \quad (19)$$

Na aproximação B.O., não é considerada a contribuição das transições entre estados eletrônicos. Logo os elementos $\langle \phi_m | \nabla^2 \bar{\Phi}_n | \phi_n \rangle$ para $m \neq n$ são ignorados. Na aproximação B.O. para níveis eletrônicos não-degenerados existe uma semelhança formal entre a equação efetiva para as variáveis nucleares (que obtemos introduzindo (19) em (16) para $m = n$) e a equação de Schrödinger para uma partícula carregada na presença de um potencial magnético A "de fundo". Esta semelhança sugere-nos reescre-

ver (19) da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \langle \phi_n | -\nabla_R^2 \Phi_n | \phi_n \rangle &= -(\nabla_R^2 + \langle \phi_n | \nabla_R^2 \phi_n \rangle - 2iA_{nn} \cdot \nabla_R) \Phi_n = \\ &= \left\{ -[\nabla_R + \langle \phi_n | \nabla_R \phi_n \rangle]^2 + \langle \nabla_R \phi_n | \nabla_R \phi_n \rangle + \right. \\ &\quad \left. + (\langle \phi_n | \nabla_R \phi_n \rangle)^2 \right\} \Phi_n \end{aligned} \quad (20)$$

ou na forma

$$-\langle \phi_n | \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \Phi_n | \phi_n \rangle = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} (\nabla_R - iA_n(\mathbb{R}))^2 + \tilde{W}_n \right\} \Phi_n \quad (21)$$

onde

$$\tilde{W}_n = \frac{\hbar^2}{2M} \left(\langle \nabla_R \phi_n | \nabla_R \phi_n \rangle - A_n^2(\mathbb{R}) \right) \quad (22)$$

Introduzindo (21) e (22) na equação (16), resulta a equação

efetiva nuclear

$$\sum_n \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} [(\nabla_R - iA_n(\mathbb{R}))^2 + \epsilon_n + \frac{\hbar^2}{2M} [\langle \nabla_R \phi_n | \nabla_R \phi_n \rangle - A_n^2(\mathbb{R})]] \right\} \Phi_n = E \Phi_n \quad (23)$$

Se o nível de energia n não é degenerado expressaremos

$$\tilde{W}_n = \sum_{k \neq n} \frac{\hbar^2}{2M} \langle \phi_n | \nabla_R \phi_k \rangle \langle \phi_k | \nabla_R \phi_n \rangle \quad (24)$$

Derivando em relação a \mathbb{R} a equação de autovalores para o operador

E_n (14), obtemos a identidade $\langle \phi_n | \nabla_R \phi_k \rangle = (\epsilon_k - \epsilon_n)^{-1} \langle \phi_n | \nabla_R \hat{E}_{el} | \phi_k \rangle$,

que nos permite reescrever (24) da seguinte maneira:

$$\tilde{W}_n = \sum_{k \neq n} (\epsilon_n - \epsilon_k)^2 \cdot \langle \phi_n | \nabla_R \hat{E}_{el} | \phi_k \rangle \langle \phi_k | \nabla_R \hat{E}_{el} | \phi_n \rangle \quad (25)$$

Se $\phi_n(r, \mathbb{R})$ é real, logo $A_{nn} = 0$. Reobtemos a equação efetiva

nuclear na aproximação B.O., para níveis eletrônicos

não-degenerados, em sua formulação tradicional:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 + \sum_{k \neq n} \left| \frac{\langle \phi_n | \nabla_R \hat{E}_{el} | \phi_k \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_k} \right|^2 + \epsilon_n \right\} \Phi_n = E \Phi_n \quad (26)$$

Wilczek, Moody e Shapere⁽¹⁶⁾ introduziram correções para a aproximação adiabática. Consideraram hamiltonianos efetivos descrevendo níveis degenerados e transições entre os autoestados eletrônicos. Generalizaram o hamiltoniano efetivo em (16) e (23), expressando a equação de Schrödinger para os autoestados nucleares, a saber,

$$\sum_n \left\{ \sum_K \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\delta_{mK} \nabla_R - i A_{mK}(R) \right) \cdot \left(\delta_{Kn} \nabla_R - i A_{Kn}(R) \right) + \delta_{mn} \epsilon_n(R) \right] \right\} \Phi_n = E \Phi_n \quad (27)$$

A evolução de uma molécula, com um nível de energia que apresenta N autoestados eletrônicos degenerados, será descrita por uma equação semelhante à (27), o potencial de gauge A_{mn} desta equação será representado por um elemento de U(1). Para determinar o nível de energia, os N autoestados degenerados serão compreendidos como um vetor de N -componentes, que adquire durante sua evolução uma fase caracterizada por uma matriz $U(N)$.

Como exemplo ilustrativo, consideremos o hamiltoniano efetivo nuclear para uma molécula diatômica com níveis de energia duplamente degenerados⁽¹⁷⁾. Suponhamos o sistema em equilíbrio. A cada instante, o eixo molecular está orientado na direção OZ. Ele pode ser caracterizado, em coordenadas esféricas, pelo par $(\theta=0, \psi=0)$. Os vetores $|R_i(t)\rangle$ ($i = 1,2$), que representam a posição relativa dos núcleos, têm somente componentes, na direção do versor K . O sistema apresenta uma simetria por rotações em torno do eixo molecular. O operador J_z é o gerador destas rotações.

Seja um sistema em que os estados são caracterizados por $J = 1/2$. Existe um isomorfismo entre as álgebras de $SU(2)$ e $SO(3)$. Os geradores J_1, J_2 e J_3 constituem uma "álgebra. Eles satisfazem a álgebra das rotações ($SU(2)$ é o grupo de recobrimento de $SO(3)$, grupo das rotações espaciais). Os autoestados da componente do momentum angular J_z serão rotulados por $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$. Associaremos $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \doteq |\uparrow\rangle \quad \alpha + |(0,0)\rangle \quad \text{e} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \doteq |(0,\pi)\rangle \doteq |\downarrow\rangle \quad \alpha - |(0,0)\rangle$. Um autoestado eletrônico pode ser caracterizado por um vetor $|\theta, \varphi\rangle$. Este é obtido de $\pm|0,0\rangle$ por rotações

$$\pm|\theta, \varphi\rangle = e^{iJ_3\varphi} \cdot e^{iJ_1\theta} \cdot e^{-iJ_3\varphi} (\pm|0,0\rangle)$$

$$\text{ou } |\theta, \varphi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (28)$$

Empregando as expressões (18) e (28) os potenciais de gauge $U(2)$ efetivos são calculados, a saber,

$$A_r = \langle \theta, \varphi | i \frac{\partial}{\partial r} | \theta, \varphi \rangle = 0 \quad (29)$$

$$A_\theta = \langle \theta, \varphi | i \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} | \theta, \varphi \rangle = \langle 0,0 | \frac{-e^{iJ_3\varphi} J_1 e^{-iJ_3\varphi}}{r} | 0,0 \rangle$$

$$= \langle 0,0 | \frac{-\cos\varphi J_1 + \sin\varphi J_2}{r} | 0,0 \rangle$$

(30)

$$A_\varphi = \langle \theta, \varphi | \frac{i}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} | \theta, \varphi \rangle = \langle 0,0 | \frac{\sin\theta \sin\varphi J_1 + \sin\theta \cos\varphi J_2 + (1-\cos\theta) J_3}{r \sin\theta} | 0,0 \rangle$$

$$= \langle 0,0 | \frac{\sin\varphi J_1 + \cos\varphi J_2 + (\csc\theta - \cot\theta) J_3}{r} | 0,0 \rangle$$

(31)

Para determinarmos os potenciais A_θ e A_φ ,

vamos introduzir os "ladder operators" J_\pm . Estes são operadores

não-hermitianos definidos pelas componentes J_1 e J_2 do operador momentum angular

$$J_{\pm} = J_1 \pm i J_2 \quad . \quad (32)$$

$$J_1 = \frac{1}{2} (J_+ + J_-) \quad . \quad J_2 = \frac{1}{2i} (J_+ - J_-) \quad (33)$$

J_{\pm} satisfazem as seguintes relações de comutação:

$$\begin{aligned} [J_+, J_-] &= 2\hbar J_3 \\ [J_{\pm}, J_3] &= \mp J_{\pm} \end{aligned} \quad (34)$$

Os operadores J_+ , J_- e J_3 formam uma álgebra. A equação de autovalores para os "ladder operator" é a seguinte

$$\begin{aligned} J_+ |\uparrow\rangle &= 0 & J_- |\downarrow\rangle &= 0 \\ J_+ |\downarrow\rangle &= \hbar |\uparrow\rangle & J_- |\uparrow\rangle &= \hbar |\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (35)$$

Por meio das definições em (33), podemos escrever como combinações de J_+ e J_- , as funções que se seguem:

$$\cos \varphi J_1 + \sin \varphi J_2 = -\frac{1}{2} (e^{i\varphi} J_+ + e^{-i\varphi} J_-)$$

$$\sin \varphi J_1 + \cos \varphi J_2 = -\frac{i}{2} (e^{i\varphi} J_+ - e^{-i\varphi} J_-) \quad (36)$$

Agora estamos em condições de calcular os potenciais A_{θ} e A_{φ} . Utilizando as expressões (30), (31), as equações de autovalores em (35) e as notações $|\uparrow\rangle \leftrightarrow +|0,0\rangle$, $|\downarrow\rangle \leftrightarrow -|0,0\rangle$, indicamos os potenciais sob a forma:

$$A_{\theta} = -\frac{1}{2r} \begin{pmatrix} \langle \uparrow | \hat{O} | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | \hat{O} | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | \hat{O} | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | \hat{O} | \downarrow \rangle \end{pmatrix}$$

onde $\hat{O} = (e^{i\varphi} J_+ + e^{-i\varphi} J_-)$

$$A_\theta = -\frac{1}{2r} \begin{pmatrix} 0 & ke^{i\varphi} \\ k^*e^{-i\varphi} & 0 \end{pmatrix}$$

(37)

$$A_\varphi = \frac{1}{2r} \begin{pmatrix} \langle \uparrow | \hat{A} | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | \hat{A} | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | \hat{A} | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | \hat{A} | \downarrow \rangle \end{pmatrix}$$

onde

$$\hat{A} = -i(e^{i\varphi} J_+ - e^{-i\varphi} J_-) + 2(\cos\theta - \text{ctg}\theta) J_3$$

$$A_\varphi = \frac{1}{2r} \begin{pmatrix} (\cos\theta - \text{ctg}\theta) & -ike^{i\varphi} \\ ik^*e^{i\varphi} & (\text{ctg}\theta - \cos\theta) \end{pmatrix}$$

(38)

Definimos:

$$K = 2 \langle \uparrow | J_1 | \downarrow \rangle$$

(39)

A intensidade do campo \mathbb{F} é obtida

$$F_{\theta,\varphi} = \partial_\theta A_\varphi - \partial_\varphi A_\theta + [A_\theta, A_\varphi] = \frac{1}{r^2} (1-K^2) r \sigma_3$$

(40)

Segundo Moody, Shapere e Wilczek, não é possível a escolha de uma base para as autofunções eletrônicas, em que os potenciais A_θ e A_φ se tornem diagonais para todo o espaço.

Sob uma redefinição de fase do estado eletrônico o potencial vetor A_{mn} (18) transforma-se como um potencial de gauge. Logo, o hamiltoniano efetivo nuclear (23) se mantém invariante. Este é semelhante ao hamiltoniano de uma partícula carregada na presença

de um campo magnético $\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}$. Quando o núcleo percorre lentamente um caminho fechado, os estados eletrônicos adquirem uma fase - a de Berry - proporcional ao fluxo magnético através da área circundada pelos núcleos.

II.3 Verificação da fase de Berry para sistemas ópticos⁽¹⁰⁾

Para determinar experimentalmente a fase de Berry, utilizaríamos sistemas em presença de um campo magnético. Por exemplo, uma partícula de spin 1/2 na presença de um campo. Este varia harmonicamente no tempo, a saber $\mathbf{B} = (B \sin \chi_0 \cos \omega t, B \sin \chi_0 \sin \omega t, B \cos \chi_0)$ onde B é constante e χ_0 fixo. A condição de evolução temporal adiabática para este sistema corresponde à: $\omega \ll \frac{2\mu B}{\hbar}$, em que $2\mu B$ é a diferença entre os níveis de energia (μ : momento magnético da partícula). Durante essa evolução, para um autoestado do operador energia, a fase de Berry $\gamma = 2\pi(1 - \cos \chi_0)$ é muito menor que a dinâmica $\gamma^d = \frac{2\pi\mu B}{\hbar\omega}$ (num período $T = 2\pi\omega^{-1}$).

Nota-se o seguinte:

- (i) a necessidade de controle do sistema para se manter a condição de evolução adiabática;
- (ii) a dificuldade em se medir a manifestação da fase de Berry.

Chiao e Wu⁽¹⁰⁾ propuseram uma verificação experimental, baseada na analogia entre os seguintes sistemas: a partícula de spin 1/2 em um campo magnético B variável, e a direção \mathbf{K} de

propagação do fóton. Esta varia à medida que o fóton percorre uma fibra óptica helicoidal. Seja S o operador de spin do fóton. O fato dessa partícula de spin 1 não ter massa de repouso garante-nos que os autovalores da helicidade: $S.K$ são $+1$ e -1 . Negligenciemos quaisquer efeitos de bi-refringência no meio óptico. Supõe-se que não haja descontinuidades na fibra óptica (quando comparadas ao comprimento de onda de luz polarizada). Nessas condições, $S.K$ é um invariante adiabático. A medida que o fóton se propaga na fibra helicoidal, o vetor K está vinculado a manter-se paralelo ao eixo local da fibra, pois o momentum do fóton se encontra nesta direção. Logo, S está também vinculado a manter-se paralelo a K . O spin "segue" B , no exemplo magnético, como o spin "segue" K , no análogo óptico. A condição de adiabaticidade, no caso do fóton, pode ser expressa em função de características geométricas da fibra:

$$L, R_c, R_T \gg d \quad . \quad (1)$$

onde L é o comprimento total, R_c raio de curvatura, R_T raio de torção e d é o diâmetro da secção transversal da fibra helicoidal.

Se um fóton penetra na fibra em um estado linearmente polarizado, combinação dos autoestados $|+\rangle$ e $|-\rangle$ da helicidade:

$$|\xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle) \quad (2)$$

seu estado final, após propagar-se através de uma helice da fibra, será:

$$|\xi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \exp(-i[\epsilon_0\tau + (\kappa\tau - \gamma_+)])|+\rangle + \exp(-i[\epsilon_0\tau - (\kappa\tau - \gamma_+)])|-\rangle \right\} \quad (3)$$

Aqui, τ representa o comprimento de arco óptico, que parametriza a

propagação na fibra helicoidal. Ele é igual ao produto do índice de refração do meio pelo comprimento de arco percorrido. A evolução do spin do fóton é governada por uma Hamiltoniana que tem uma forma similar àquela do caso magnético:

$$\hat{H}(\tau) = H_0 + \kappa \mathbf{S} \cdot \mathbf{K}(\tau) \quad (4)$$

Nessa expressão, H_0 define a "background propagation" e ϵ_0 : um autovalor desse operador. Sob esta forma (4), $\hat{H}(\tau)$ é a mais geral hamiltoniana que podemos compor a partir dos vetores \mathbf{S} e $\mathbf{K}(\tau)$ para uma partícula de spin 1, sem massa, em um meio isotrópico com secção transversal constante. κ é uma constante de acoplamento, medida experimentalmente. A equação de movimento para o spin do fóton é a seguinte:

$$i \frac{\partial}{\partial \tau} |K(\tau), \alpha\rangle = \hat{H}(\tau) |K(\tau), \alpha\rangle \quad (5)$$

$|K(\tau), \alpha\rangle$ são autofunções de H_0 e $\mathbf{S} \cdot \mathbf{K}$, a saber,

$$H_0 |K(\tau), \alpha\rangle = \epsilon_0 |K(\tau), \alpha\rangle \quad (6)$$

e

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{K} |K(\tau), \alpha\rangle = \alpha |K(\tau), \alpha\rangle \quad (7)$$

O número quântico de helicidade α assume os valores +1 e -1. Denotaremos $|K(\tau), 1\rangle \doteq |+\rangle$ e $|K(\tau), -1\rangle \doteq |-\rangle$. A invariância adiabática da helicidade do fóton implica que, em cada ponto τ , o estado do spin $|K(\tau), \alpha\rangle$ satisfaz a equação de autovalor (7). Nota-se que resulta de (2) e (3): $|\langle \xi | \xi' \rangle|^2 = \cos^2(\kappa\tau - \gamma_+)$. Pela lei de Malus, isso implica que o plano de polarização foi rodado de um ângulo $\kappa\tau - \gamma_+$.

A trajetória helicoidal na fibra obriga a $\mathbf{K}(e\mathbf{S})$ traçar no espaço de parâmetros (K_x, K_y, K_z) uma curva fechada C na superfi-

cie de uma esfera. Em virtude da simetria radial, a origem do espaço de parâmetros $\mathbb{K} = 0$ é singular. A fase de Berry resulta em

$$\gamma_+(C) (= -\gamma_-(C)) = -\Omega(C) \quad (8)$$

sendo $\Omega(C)$ o ângulo sólido delimitado por C em relação à origem ($\mathbb{K} = 0$). No caso especial da hélice uniforme, C é um círculo e

$$\Omega(C) = 2\pi N(1 - \cos\Theta) \quad (9)$$

N significa o número de voltas completas da hélice e Θ (o "pitch angle"), ângulo formado pelo eixo local da fibra e o eixo da hélice. Novamente, a fase de Berry pode ser vista como resultado do transporte paralelo ao longo do laço C , na presença de um monopolo de intensidade 1 na origem $\mathbb{K} = 0$. Se a fibra fosse uma reta, γ seria nula. Qualquer rotação no plano de polarização do fóton seria em virtude do parâmetro k , que surge da atividade óptica do meio e pode ser medido separadamente. A fase de Berry é independente de k . A fase dinâmica é expressa em termos de k e ξ_0 :

$$\gamma_{\pm}^d = (\xi_0 \pm k)\tau. \quad (10)$$

A condição (1) é necessária para que a evolução do fóton seja adiabática. Vamos mostrar que as amplitudes de transição $\langle - | \frac{\partial}{\partial \tau} | + \rangle$ e $\langle + | \frac{\partial}{\partial \tau} | - \rangle$ são nulas. Reescrevemos (5) com a definição da Hamiltoniana (4) e a equação de autovalores (6), a saber,

$$\hat{H} |k(\tau), \alpha\rangle = (\xi_0 + \alpha k) |k(\tau), \alpha\rangle \quad (11)$$

Vamos derivar essa expressão em relação a τ :

$$\left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial \tau} + \hat{H} \frac{\partial}{\partial \tau} \right) |k(\tau), \alpha\rangle = \left(\frac{\partial}{\partial \tau} (\xi_0 + \alpha k) + (\xi_0 + \alpha k) \frac{\partial}{\partial \tau} \right) |k(\tau), \alpha\rangle \quad (12)$$

O produto de (12) e $\langle k(\tau), \alpha |$ resulta em:

$$\begin{aligned} & \langle K(\tau), -\alpha | \frac{\partial H}{\partial \tau} | K(\tau), \alpha \rangle + (\epsilon_0 - \alpha K) \langle K(\tau), -\alpha | \frac{\partial}{\partial \tau} | K(\tau), \alpha \rangle = \\ & (\epsilon_0 + \alpha K) \langle K(\tau), -\alpha | \frac{\partial}{\partial \tau} | K(\tau), \alpha \rangle \\ & (2K)^{-1} \langle K(\tau), -\alpha | \frac{\partial H}{\partial \tau} | K(\tau), \alpha \rangle = \langle K(\tau), -\alpha | \frac{\partial}{\partial \tau} | K(\tau), \alpha \rangle \end{aligned} \quad (13)$$

Note-se que em $H(4)$ apenas $K(\tau)$ depende do parâmetro τ
 $\frac{\partial \hat{H}}{\partial \tau} = K S \frac{\partial K}{\partial \tau}$. Se reescrevermos $\tau = n \cdot \ell$ em função do índice n
 de refração do meio e do comprimento de arco ℓ da fibra, a ampli-
 tude de transição será:

$$\begin{aligned} \langle K(\tau), -\alpha | \frac{\partial}{\partial \tau} | K(\tau), \alpha \rangle &= \frac{1}{2K} \langle K(\tau), -\alpha | K S \frac{\partial K}{\partial \tau} | K(\tau), \alpha \rangle \\ &= (2n)^{-1} \langle K(\tau), -\alpha | S \cdot \frac{\partial K}{\partial \tau} | K(\tau), \alpha \rangle \\ &= (2n R_c)^{-1} \langle K(\tau), -\alpha | S \cdot \eta(\tau) | K(\tau), \alpha \rangle \end{aligned} \quad (14)$$

onde $\eta(\tau)$ é a normal principal da hélice. Sendo S um operador vetorial, pelo teorema de Wigner-Eckart, teremos:

$$\langle K(\tau), -\alpha | S \cdot \eta | K(\tau), \alpha \rangle = 0 \quad \Delta \alpha = |\alpha - (-\alpha)| = 2 \quad (15)$$

Portanto, não ocorre nenhuma violação ao teorema adiabático, não importa quais sejam as dimensões de K . Este é um caso especial, devido à forma da hamiltoniana (4) e do caráter vetorial do fóton (partícula spin-1, sem massa de repouso). Normalmente, a aplicabilidade do teorema adiabático está condicionada a que o sistema evolua lentamente no tempo. Mas em nosso caso, o fóton percorre a fibra com a velocidade C . No entanto, existe outra escala de tempo mais rápida: o tempo para a luz cruzar o diâmetro da fibra (em geral $d \sim \mu$).

II.4 Partícula de Spin 1/2 na presença de um Campo Magnético

Consideremos uma partícula de spin s na presença de um campo magnético $B(t)$ que varia ciclicamente⁽²⁾. O hamiltoniano associado a este sistema

$$\hat{H}(B) = K\hbar \hat{S} \cdot B(t) \quad (1)$$

apresenta uma dependência no campo magnético $B(t)$, visto como parâmetro do problema. O hamiltoniano contém o operador de spin \hat{S} , a constante K (que envolve o fator giromagnético). O operador \hat{S} possui um espectro discreto com $2s + 1$ autovalores, rotulados por inteiros variando entre $-S$ e S , que denotaremos pela letra n . Os autovalores associados ao operador energia \hat{E} do sistema revelam uma dependência no módulo do campo magnético $|B(t)| \equiv B(t)$, a saber,

$$E_n(B) = nK\hbar B(t) \quad (2)$$

Quando $B(t) = 0$, temos um exemplo de degenerescência, que tratamos anteriormente (I.3). A fase de Berry, associada aos $2s + 1$ autoestados degenerados, apresenta uma interpretação geométrica no espaço dos parâmetros B . Denotaremos os autoestados do operador \hat{S} ao longo da direção do campo $B(t)$ por $|n, S_{//}\rangle$.

O espaço de parâmetros B desse sistema é tridimensional. Introduzindo na expressão (I.1.19) os autovalores E_n (2), o hamiltoniano \hat{H} (1), visto como operador energia \hat{E} , obtemos a seguinte expressão para a curvatura de Berry $V_n(B)$:

$$V_n(B) = \text{Im} \frac{1}{B^2} \sum_{l \neq n} \frac{\langle n, S_{//} | \hat{S} | l, S_{//} \rangle \langle l, S_{//} | \hat{S} | n, S_{//} \rangle}{(E_l - E_n)^2} \quad (3)$$

A expressão (3) supõe implicitamente que variamos o campo magnético $B(t)$ de maneira lenta. Sem perda de generalidade, vamos calcular os produtos em (3) rodando os eixos coordenados, de modo que o campo B coincida com a direção do eixo OZ . Se os operadores $\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i \hat{S}_y$ atuarem nos autoestados $|n, S_{//}\rangle$

$$\begin{aligned}\hat{S}_+ |n, S_{//}\rangle &= \sqrt{S(S+1) - n(n+1)} |n+1, S_{//}\rangle \\ \hat{S}_- |n, S_{//}\rangle &= \sqrt{S(S+1) - n(n-1)} |n-1, S_{//}\rangle\end{aligned}\quad (4)$$

(onde n varia nos inteiros entre $-S$ e S), somente os elementos em (3) com $\ell = n \pm 1$ resultarão em contribuições não-nulas. A escolha de elementos da forma: $\langle n \pm 1 | \cdot | n \rangle$ ou $\langle n | \cdot | n \pm 1 \rangle$ implica que as componentes x e y do vetor V_n no espaço de parâmetros são nulas. O fato delas serem nulas decorre de (3). As componentes V_x e V_y são combinações de elementos de matriz que envolvem termos não diagonais do operador \hat{S}_z :

$$\begin{aligned}\hat{S}_z |n, S_{//}\rangle &= n |n, S_{//}\rangle \\ \langle n \pm 1, S_{//} | \hat{S}_z |n, S_{//}\rangle &= 0\end{aligned}\quad (5)$$

Escrevendo os elementos em função dos operadores S_x e S_y :

$$\begin{aligned}\langle n \pm 1, S_{//} | \hat{S}_x |n, S_{//}\rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{S(S+1) - n(n \pm 1)} \\ \langle n \pm 1, S_{//} | \hat{S}_y |n, S_{//}\rangle &= \mp \frac{1}{2} i \sqrt{S(S+1) - n(n \pm 1)}\end{aligned}\quad (6)$$

expressaremos a componente z do vetor V_n , a saber,

$$\begin{aligned}V_{zn} &= \text{Im} \left\{ \frac{1}{B^2} \left[\langle n | \hat{S}_x |n+1\rangle \langle n+1 | \hat{S}_y |n\rangle - \langle n | \hat{S}_y |n+1\rangle \langle n+1 | \hat{S}_x |n\rangle \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \langle n | \hat{S}_x |n-1\rangle \langle n-1 | \hat{S}_y |n\rangle - \langle n | \hat{S}_y |n-1\rangle \langle n-1 | \hat{S}_x |n\rangle \right] \right\} = \\ &= n \cdot B^{-2}\end{aligned}\quad (7)$$

onde $|n\rangle$ e $|n \pm 1\rangle$ representam $|n, S_{//}\rangle$ e $|n \pm 1, S_{//}\rangle$, respectivamente.

De forma geral, uma partícula de spin S na presença de um

campo magnético $B(t)$, que varia cíclica e adiabaticamente, apresenta a curvatura de Berry $V_n(B)$ sob a forma

$$V_n(B) = \frac{nB}{B^3} \quad (8)$$

A expressão da fase de Berry γ_n , em termos da integral de superfície da curvatura $V_n(B)$ (I.1.18) possibilita interpretarmos γ_n como o fluxo do campo de um monopólo de carga $-n$, presente na origem do espaço de parâmetros B , que atravessa uma superfície, cujo bordo é a curva Γ . A fase geométrica

$$\gamma_n(\Gamma) = -n \Omega(\Gamma) \quad (9)$$

depende somente do autovalor n da componente do spin ao longo de $B(t)$. Ela é proporcional ao ângulo sólido $\Omega(\Gamma)$, delimitado pela curva Γ e centro em $B = 0$. Para férmions, uma volta completa de B (o que corresponde a uma rotação de 2π em um plano e) resulta num fator de fase igual a -1 . A mesma situação para bósons produz um fator de fase igual a $+1$.

Consideremos a formulação de Aharonov e Anandan⁽⁸⁾, para uma partícula de spin $S = 1/2$ na presença de um campo magnético homogêneo ao longo do eixo OZ . Vamos admitir que a direção do estado-spin esteja a um ângulo θ (constante) do eixo OZ . O hamiltoniano correspondente ao sistema

$$\hat{H} = -\mu \sigma_z B = -\mu \begin{pmatrix} B_3 & 0 \\ 0 & -B_3 \end{pmatrix} \quad (10)$$

onde μ é o momento magnético da partícula. A equação de Schrödinger para o estado $|\psi(t)\rangle$ da partícula contém o hamiltoniano H expresso em (10)

$$\hat{H} |\psi(t)\rangle = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \quad (11)$$

A solução desta equação é a seguinte:

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} e^{i\phi(t)} \cdot \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ e^{-i\phi(t)} \cdot \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (12)$$

em que $\phi(t)$ tem dimensões de frequência vezes tempo e é igual a $(\mu B \cdot \hbar^{-1})t$. As funções $\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$ e $\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ podem ser expressas pelas componentes do campo B:

$$\cos\theta = B_3 \cdot |B|^{-1}$$

$$\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{|B| + B_3}{\sqrt{2|B|(|B| + B_3)}} \quad \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{|B| - B_3}{\sqrt{2|B|(|B| - B_3)}} \quad (13)$$

A evolução do sistema é cíclica, com período $T = \frac{\pi\hbar}{\mu B}$. Na formulação de Berry, sob a hipótese de adiabaticidade $\frac{\mu B}{\hbar} \gg \omega$ (ω é a frequência da órbita fechada de $|B\rangle$), obtínhamos para cada ciclo, a fase de Berry proporcional ao ângulo sólido. O bordo do ângulo era caracterizado pela curva de evolução do parâmetro: $|B(t)\rangle$. Na formulação de A.A., chegamos à expressão para a fase geométrica γ para sistemas cíclicos, sem lançarmos mão da hipótese de adiabaticidade quanto a parâmetros. A evolução do nosso sistema é parametrizada pelo tempo t . A fase geométrica γ , em (I.2.3), assume para o nosso sistema a forma:

$$\gamma = \phi - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\frac{\pi\hbar}{\mu B}} \langle \Psi(t') | -\mu \sigma_z B | \Psi(t') \rangle dt' \quad (14)$$

onde a fase total ϕ para um ciclo é igual a 2π e o estado $|\Psi(t)\rangle$ é expresso por

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar} \mu B t} \cdot \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ e^{-\frac{i}{\hbar} \mu B t} \cdot \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (15)$$

Assim, obtemos a fase geométrica:

$$\gamma(s) = \pi(1 - \cos\theta) = -\frac{1}{2} \Omega(s) \quad (16)$$

em que $\Omega(s)$ corresponde ao ângulo sólido, cujo bordo é a curva descrita pela evolução do estado-spin. Embora a fase obtida originalmente por Berry⁽²⁾ seja semelhante à fase geométrica (31), em forma, elas apresentam diferenças conceituais. Na formulação original, a fase de Berry (θ) é proporcional ao ângulo sólido $\Omega(B)$ definido no espaço de parâmetros B . O bordo do ângulo é a curva percorrida adiabaticamente pelo campo magnético variável. Na formulação de A.A., a fase geométrica (I.2.4) é proporcional ao ângulo sólido $\Omega(s)$, cujo bordo é a curva percorrida pelo estado-spin S .

As equações de Heisenberg de movimento para as componentes do operador \hat{S} : \hat{S}_z , \hat{S}_x e \hat{S}_y são as seguintes:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{S}_z &= 0 \\ \frac{d}{dt} \hat{S}_x(t) &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{S}_x, \hat{H}] = 2\mu_B \hbar^{-1} \hat{S}_y \\ \frac{d}{dt} \hat{S}_y(t) &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{S}_y, \hat{H}] = -2\mu_B \hbar^{-1} \hat{S}_x \end{aligned} \quad \hat{S} = \frac{1}{2} \hbar \sigma \quad (17)$$

visto que essas componentes não apresentam dependência explícita no tempo $\frac{\partial \hat{S}_i}{\partial t} = 0$ e o sistema é conservativo: $\frac{d\hat{H}}{dt} = 0$.

A evolução temporal das componentes do operador de spin S é assim expressa:

$$\begin{aligned} \hat{S}_z(t) &= e^{-\frac{i\omega t \sigma_z}{2}} \hat{S}_z e^{\frac{i\omega t \sigma_z}{2}} = \hat{S}_z = \frac{1}{2} \hbar \sigma_z \\ \hat{S}_x(t) &= e^{-\frac{i\omega t \sigma_z}{2}} \hat{S}_x e^{\frac{i\omega t \sigma_z}{2}} = \hat{S}_x \cosh\left(-i\frac{\omega}{2}t\right) + i \hat{S}_y \sinh\left(-i\frac{\omega}{2}t\right) \\ \hat{S}_y(t) &= e^{-\frac{i\omega t \sigma_z}{2}} \hat{S}_y e^{\frac{i\omega t \sigma_z}{2}} = -i \hat{S}_x \sinh\left(-i\frac{\omega}{2}t\right) + \hat{S}_y \cosh\left(-i\frac{\omega}{2}t\right) \end{aligned} \quad (18)$$

em função da frequência ω , relacionada com a diferença dos níveis de energia:

$$\hbar\omega = 2\mu B \quad (19)$$

Os valores esperados de S_x , S_y e S_z para o estado $|\psi(t)\rangle$ (12) são

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \hat{S}_z | \psi(t) \rangle &= -\mu B (\cos^2(\frac{\theta}{2}) - \sin^2(\frac{\theta}{2})) = -\mu B \cos\theta \\ \langle \psi(t) | \hat{S}_x | \psi(t) \rangle &= -\mu B (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \cos(\frac{\theta}{2}) \sin(\frac{\theta}{2}) = -\mu B \sin\theta \cos(\omega t) \\ \langle \psi(t) | \hat{S}_y | \psi(t) \rangle &= i\mu B (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) \cos(\frac{\theta}{2}) \sin(\frac{\theta}{2}) = -\mu B \sin\theta \sin(\omega t) \end{aligned} \quad (20)$$

$\langle |\hat{S}_x| \rangle$ e $\langle |\hat{S}_y| \rangle$ "giram" em torno do eixo OZ com frequência ω , enquanto $\langle |\hat{S}_z| \rangle$ se mantém inalterado. A curva descrita pelo vetor-estado S é bordo que delimita o ângulo sólido $\Omega(S)$. Este, como dissemos anteriormente, é proporcional à fase geométrica do sistema.

II.5 A Fase Adiabática e a Fase de Pancharatnam para Luz Polarizada⁽⁴²⁾

Na década de 50, Pancharatnam propôs a seguinte questão: "dados dois feixes de luz polarizada, existe uma maneira natural de se comparar as fases destes feixes?" [59]. Motivado por seus estudos sobre interferência de luz polarizada, Pancharatnam propôs o seguinte critério: dois feixes polarizados estão "em fase", quando a interferência dos feixes superpostos resulta em uma intensidade máxima. Este critério corresponde a uma "conexão" (geométrica), que nos permite comparar fases entre dois estados de

polarização (não ortogonais entre si), não necessariamente "vizinhos" na esfera de Poincaré Σ . [Apêndice 2]

No tratamento do eletromagnetismo clássico para a luz, uma onda plana monocromática, propagando-se na direção OZ, é representada por $E = \text{Re} [(a_x \hat{e}_x + a_y \hat{e}_y) e^{i(kz - \omega t)}]$, em que \hat{e}_x e \hat{e}_y são os versores na direção x e y, respectivamente. A onda plana monocromática corresponde um feixe de luz com as duas componentes ortogonais do campo elétrico, cujas amplitudes e fases estão contidas em a_x e a_y . Diferentes valores dessas amplitudes correspondem a diferentes estados de polarização do feixe (polarização plana, circular ou elíptica). Embora os fótons tenham um spin $S = 1$ (o que deveria corresponder a $2S + 1 = 3$ possíveis orientações do spin), a condição de transversalidade das ondas eletromagnéticas reduz o número de graus de liberdade para dois, exatamente o mesmo que para partículas de spin $1/2$.

O estado de polarização de um feixe de luz é descrito por um vetor unitário complexo:

$$d = (d_x, d_y) \quad , \quad d^* \cdot d = 1 \quad (1)$$

ao qual corresponde um vetor coluna com duas componentes:

$$\Psi = \begin{bmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} d_x + i d_y \\ d_x - i d_y \end{bmatrix} \quad (2)$$

A intensidade I do feixe é a soma das probabilidades para as duas orientações do spin (semelhante ao caso de partículas com spin $1/2$ existem duas possíveis orientações do spin), a saber,

$$I = \Psi^\dagger \cdot \Psi = (\psi_+^* \cdot \psi_+) + (\psi_-^* \cdot \psi_-) = d^* \cdot d = 1 \quad (3)$$

Logo, Ψ deve ser normalizado a 1. Cada spinor Ψ será entendido

como um autovetor de uma matriz hermitiana 2×2 (a matriz de polarização) da forma

$$\hat{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (4)$$

$\mathbf{r}(x, y, z)$ é um vetor unitário caracterizado pelos ângulos θ e ϕ (coordenadas esféricas). Como toda matriz 2×2 pode ser expressa pela combinação das matrizes de Pauli $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ e da unidade $\mathbb{1}$, na seguinte forma:

$$\hat{H} = a \mathbb{1} + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (5)$$

a escolha $a = 0$ nos conduz á expressão de H em (4). Cada configuração de \mathbf{r} define uma matriz $H(\mathbf{r})$, cujo autovetor é o estado de polarização $\Psi(\mathbf{r})$. Os polos $\theta = 0$ e $\theta = \pi$ correspondem a $\Psi_- = 0$ e $\Psi_+ = 0$ respectivamente. Estas configurações de \mathbf{r} representam os dois sentidos de polarização circular. Os pontos no Equador $\theta = \frac{\pi}{2}$ caracterizam $|\Psi_+| = |\Psi_-|$ e representam as diferentes direções que a polarização linear assume. Outras configurações de \mathbf{r} definem os diferentes estados de polarização elíptica. A descrição desses estados será formulada em termos de esfera de Poincaré Σ , na qual estão definidas as coordenadas (θ, ϕ) [Apêndice 2]. Identificaremos o ponto \mathbf{r}_A na esfera Σ ao estado de polarização $\Psi(\mathbf{r}_A)$, denotando $|\Psi(\mathbf{r}_A)\rangle \doteq |A\rangle$.

Sejam $|A\rangle$ e $|B\rangle$ dois estados representados na esfera de Poincaré, normalizados e não ortogonais. A interferência desses estados por superposição resulta na intensidade:

$$(\langle A| + \langle B|) \cdot (|A\rangle + |B\rangle) = \langle A|A\rangle + \langle B|B\rangle + 2 \operatorname{Re} \langle A|B\rangle \quad (6)$$

A diferença de fase entre $|A\rangle$ e $|B\rangle$ é simplesmente a fase do

produto escalar $\langle A|B \rangle$. Os estados $|A\rangle$ e $|B\rangle$ são definidos "em fase" pelo critério de Pancharatnam, se $\langle A|B \rangle$ é real e positivo. Em geral, se expressamos o número complexo $\langle A|B \rangle$ na forma polar $\rho e^{i\alpha}$, onde $\rho > 0$, então a diferença de fase entre $|A\rangle$ e $|B\rangle$ é α . O critério de Pancharatnam define uma relação entre dois estados (não-ortogonais), não necessariamente vizinhos em Σ . Neste sentido, assemelha-se às noções geométricas de conexão e paralelismo, envolvidas quando comparamos vetores em diferentes pontos no espaço.

Pancharatnam observou, no entanto, que essa relação entre dois estados não é transitiva: se $|B\rangle$ está em fase com $|A\rangle$ e $|C\rangle$ com $|B\rangle$ então $|C\rangle$ não está necessariamente em fase com $|A\rangle$. Se $|C\rangle$ está em fase com um estado $|\tilde{A}\rangle$, definido no ponto r_A da esfera de Poincaré, então

$$\langle A|\tilde{A}\rangle = e^{-\frac{i}{2}\Omega_{ABC}} \quad (7)$$

Ω_{ABC} é o ângulo sólido do triângulo geodésico ABC em Σ .

Berry considerou a evolução de um sistema quântico com 2 níveis (estados), V.G., uma partícula de spin 1/2. A evolução temporal desse sistema é descrita por um hamiltoniano na forma (4). Vamos admitir que a aproximação adiabática seja válida para o problema considerado. Se o autoestado inicial é descrito por $\Psi(r_A)$, em um instante t , o sistema estará neste autoestado $\Psi(r(t))$, mas acrescido de uma fase (após subtrairmos a fase dinâmica), caracterizada pela conexão:

$$\langle \Psi | \frac{d}{dt} \Psi \rangle = 0 \quad (8)$$

De (8), decorre que o sistema de dois níveis, ao percorrer um laço

Γ , (cujo ponto inicial e final é r_A) apresenta uma diferença de fase (após subtrairmos a fase dinâmica) expressa no fator de fase presente em

$$\langle \Psi(r_A) | \tilde{\Psi}(r_A) \rangle = e^{-\frac{i}{2} \Omega(\Gamma)} \quad (9)$$

Neste produto, $\Omega(\Gamma)$ representa o ângulo sólido delimitado por Γ . $|\Psi(r_A)\rangle$ e $|\tilde{\Psi}(r_A)\rangle$ denotam o autoestado inicial e o transportado ao longo de Γ , respectivamente. A semelhança entre (7) e (9) sugeriu a Ramaseshan, Nityananda⁽²⁰⁾ e, posteriormente, a Berry⁽¹²⁾ a equivalência entre a "conexão" de Pancharatnam e a adiabática (8). Assim, se $|\Psi(t)\rangle$ é transportado de acordo com (8) ao longo da geodésica que une os pontos r_A e r_B , a saber,

$$|\Psi(0)\rangle = |A\rangle \quad , \quad |\Psi(T)\rangle = |B\rangle \quad (10)$$

logo, $\langle A|B\rangle$ deve ser real e positivo. Para entender essa equivalência entre as conexões, primeiramente vamos introduzir o operador unitário U , dependente do tempo, que relaciona os estados $|A\rangle$ e $|B\rangle$ da seguinte maneira:

$$|B\rangle = U(T)|A\rangle \quad (11)$$

O transporte do autoestado $|\Psi(t)\rangle$ do sistema ao longo da curva que liga r_A a r_B , segundo a conexão definida em (8), caracteriza o operador $U(t)$, como se segue [Apêndice 3]:

$$U(T) = \hat{T} \left\{ \exp\left(-i \int_0^T \vec{\omega}(t') \cdot \sigma dt'\right) \right\} \quad (12)$$

Na expressão de U , \hat{T} denota ordenamento temporal e $\vec{\omega}(t)$ a velocidade angular instantânea do referencial transportado paralelamente na esfera Σ , ao longo de uma curva que liga r_A a r_B . Para uma geodésica, $\vec{\omega}$ é paralela ao vetor unitário n , perpendicular ao plano da geodésica, e podemos reescrever o vetor velocidade angu-

lar sob a forma

$$\vec{\omega}(t) = \omega(t)\mathbf{n}. \quad (13)$$

Se o ângulo ϕ_{AB} entre $|A\rangle$ e $|B\rangle$ é obtido a partir da frequência $\vec{\omega}$:

(Fig. IV)

$$\phi_{AB} = \int_0^T \omega(t') dt'. \quad (14)$$

o operador unitário $U(t)$ (12) será reescrito (com o auxílio das expressões (13) e (14)) da seguinte maneira:

$$U(T) = \exp\left\{-i\phi_{AB} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}\right\} = \cos\left(\frac{\phi_{AB}}{2}\right) - i\sin\left(\frac{\phi_{AB}}{2}\right) \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (15)$$

Estamos agora em condições de mostrar que $\langle A|B\rangle$ é real e positivo. O produto $\langle A|U(T)|A\rangle$ pode ser avaliado com auxílio das expressões (11), (15) e então obtemos:

$$\langle A|B\rangle = \cos\left(\frac{\phi_{AB}}{2}\right) - i\sin\left(\frac{\phi_{AB}}{2}\right) \langle A|\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}|A\rangle \quad (16)$$

O elemento $\langle A|\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}|A\rangle$ é nulo, pois envolve o valor esperado da componente do spin S ao longo da direção \mathbf{n} . Esta direção é perpendicular a \mathbf{n}_A . Observemos que $|A\rangle$ é um autoestado de $\mathbf{n}_A \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Logo, $\langle A|B\rangle$ é real e positivo, desde que $|\phi_{AB}| < \pi$.

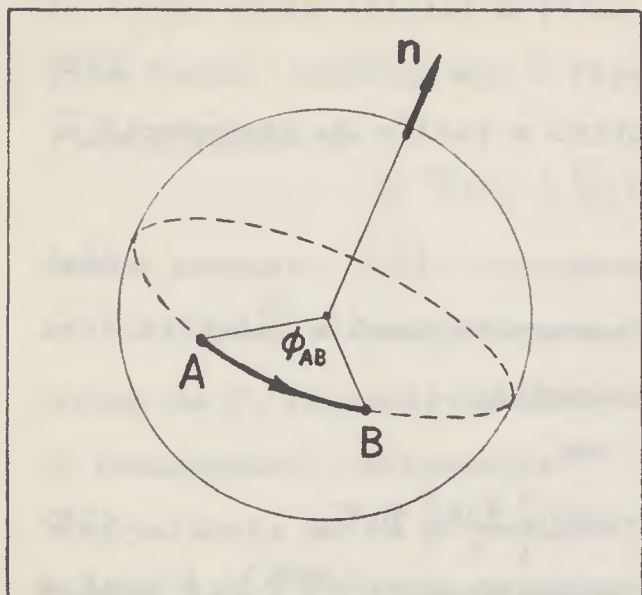


Fig. IV

Arco Geodésico na
Esfera de Poincaré

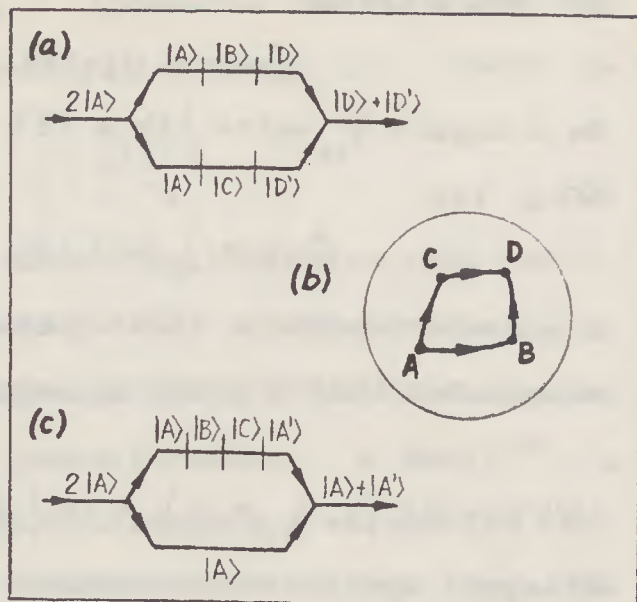


Fig. V

Efeito A.B. sobre a
esfera de Poincaré

Pancharatnam pôde confirmar suas previsões. Indiretamente, verificou seu critério, detectando uma diferença de fase entre estados de polarização, em experiências que envolviam interferência de feixes. Observa-se que a expressão (7) está em concordância com os dados experimentais, mesmo para sistemas ópticos em que a polarização varia subitamente (como é o caso da propagação de feixes nos cristais birrefringentes). Essa concordância com os dados experimentais é uma evidência de que as expressões (7) e (9) dependem somente da conexão (8), embora, originalmente, (9) tenha sido deduzida no contexto da aproximação adiabática.

Vamos, a seguir, apresentar um resultado análogo à "diferença de fase" presente no efeito A.B. Neste, dois feixes de elétrons

desenvolvem uma diferença de fase proporcional a um fluxo magnético. No análogo óptico, o fluxo magnético é representado pelo ângulo sólido delimitado por um polígono, definido na esfera de Poincaré. O "fluxo" é devido a uma carga de intensidade $-1/2$, situada no centro da esfera Σ . Um feixe $2|A\rangle$, dividido em dois, evolui por estados intermediários $|B\rangle$ e $|C\rangle$ respectivamente. A seguir, os dois feixes são analisados em uma polarização D. Logo, os estados $|D\rangle$ e $|D'\rangle$ diferirão em fase por $\frac{1}{2}\Omega_{ABCD}$. O ângulo sólido Ω_{ABCD} é delimitado pelo polígono geodésico ABCDA sobre a esfera Σ (Fig. Va e Vb). Obtemos uma analogia com o efeito A.B., considerando um feixe $2|A\rangle$ dividido em dois, a saber, um feixe continua no estado $|A\rangle$, enquanto o outro retorna ao ponto r_A na esfera Σ no estado $|A'\rangle$, após percorrer estados intermediários $|B\rangle$ e $|C\rangle$ (Fig. Vc). Da interferência entre $|A\rangle$ e $|A'\rangle$ obtemos a diferença de fase $-\frac{1}{2}\Omega_{ABC}$.

Resgatemos um estado obtido originalmente por Pancharatnam. Consideremos a decomposição de um feixe com polarização $|C\rangle$ em dois, com polarizações $|A\rangle$ e $|B\rangle$, da seguinte forma:

$$|C\rangle = a|A\rangle + b|B\rangle \quad (17)$$

Suponhamos que $|A\rangle$ e $|B\rangle$ estão em fase, ou seja, $\langle A|B\rangle$ é real e positivo. A fase relativa Δ_{AB} entre os dois feixes está relacionada à razão b/a .

Podemos reescrever (17) em termos da fase relativa Δ_{AB} , a saber,

$$|C\rangle = |a|(|A\rangle) + e^{i\Delta_{AB}} \cdot |b|(|B\rangle) \quad \frac{b}{a} = r e^{i\Delta_{AB}}, r \in \mathbb{R}_+$$

$$|C\rangle = a(|A\rangle + r e^{i\Delta_{AB}} |B\rangle) \quad (18)$$

o estado antípoda $|\underline{C}\rangle$ é ortogonal a $|C\rangle$, ou seja,

$$\langle \underline{C} | C \rangle = 0. \text{ Se multiplicarmos a expressão (18) por } \langle \underline{C} |$$

obteremos a relação

$$\langle \underline{C} | C \rangle = a (\langle \underline{C} | A \rangle + r e^{i\Delta_{AB}} \langle \underline{C} | B \rangle) = 0$$

$$\frac{b}{a} = r e^{i\Delta_{AB}} = - \frac{\langle \underline{C} | A \rangle}{\langle \underline{C} | B \rangle}. \quad (19)$$

Escolhemos $|\underline{C}\rangle$ em fase com $|A\rangle$, tal que $\langle \underline{C} | A \rangle$ é real e positivo. Denotemos por λ a fase de $\langle \underline{C} | B \rangle$, o que nos permite escrever: $\langle \underline{C} | B \rangle = |\langle \underline{C} | B \rangle| e^{i\lambda}$. Estamos em condições de expressar uma relação entre Δ_{AB} e λ , a partir da equação (19):

$$\frac{r}{\langle \underline{C} | A \rangle} = \frac{-e^{-i\Delta_{AB}}}{\langle \underline{C} | B \rangle} = \frac{e^{i(\pi - \Delta_{AB})} \cdot e^{-i\lambda}}{|\langle \underline{C} | B \rangle|} \quad (20)$$

Se r , $\langle \underline{C} | A \rangle$ e $|\langle \underline{C} | B \rangle|$ são reais e positivos, de (20) concluímos

$$\Delta_{AB} = \pi - \lambda. \quad (21)$$

Consideremos o triângulo $BACB'$, que percorremos do estado $|B\rangle$ ao $|B'\rangle$. De (7) decorre $\langle B | B' \rangle = \exp\left\{-\frac{i}{2} \oint_{BAC} \Omega\right\}$. Sabemos que $|B\rangle$ está em fase com $|A\rangle$ e $|A\rangle$ com $|\underline{C}\rangle$. Logo, a fase de $\langle \underline{C} | B \rangle$ é igual a $-\frac{1}{2} \oint_{BAC} \Omega$, ou seja,

$$\lambda = \frac{1}{2} \oint_{\underline{C}AB} \Omega \quad (22)$$

Pancharatnam concluiu que a decomposição de um feixe com polarização $|C\rangle$ em dois com polarizações $|A\rangle$ e $|B\rangle$ (17) resulta numa fase relativa Δ_{AB} entre ambos, igual a (21), (22) $\left(\pi - \frac{1}{2} \oint_{\underline{C}BA} \Omega\right)$.

Berry chama-nos atenção a fim de distinguir a fase de Pancharatnam e a prevista por Chiao e Wu para a propagação de luz circularmente polarizada ao longo de um "twisting path". Na formulação de Pancharatnam, o ângulo sólido é delimitado por um

caminho percorrido na esfera dos estados de polarização de um sistema de dois níveis. Embora o fóton seja uma partícula de spin 1, ele pode ser visto como um sistema de dois estados: para ondas planas, a condição de transversalidade possibilita apenas estados de helicidade, nos quais o spin é paralelo, ou antiparalelo, à direção de propagação \mathbb{K} da onda. Nos experimentos ópticos em "twisting path", à medida que a luz se propaga, a direção de \mathbb{K} é modificada adiabaticamente, sendo descrito um caminho na esfera das direções \mathbb{K} , que delimita um ângulo sólido. Esse caminho significa a rotação do spinor a 3 componentes do fóton. Num referencial de laboratório, o spinor que representa o estado do fóton (para a luz propagando-se transversalmente na direção \mathbb{K}) assume a forma em coordenadas esféricas (θ, ϕ) , a saber,

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} [\alpha + \beta + (\alpha - \beta) \cos \theta] e^{-i\phi} \\ \sqrt{2(\alpha - \beta)} \sin \theta \\ [\alpha + \beta - (\alpha - \beta) \cos \theta] e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (23)$$

α e β estão vinculados pela relação: $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Em um referencial móvel, cujo eixo z coincida com \mathbb{K} , teremos a componente longitudinal (spin-zero) do spinor nula.

A diferença entre a esfera de Poincaré das polarizações (spin 1/2) e a das direções de propagação \mathbb{K} está refletida nas distintas dependências das fases geométricas com relação ao ângulo sólido Ω , a saber,

(a) para um ciclo na esfera de direções de \mathbb{K} , a fase geométrica (onda circularmente polarizada) é proporcional $\pm \Omega$.

(b) num ciclo na esfera Σ , a fase geométrica é proporcional a:

$$-\frac{\Omega}{2}$$

III.1 O Oscilador Harmônico Generalizado⁽¹⁾

III.1.1 Introdução

Um oscilador harmônico generalizado O.H.G., dependente do tempo, pode ser descrito por uma hamiltoniana

$$H = \frac{1}{2} [a(t)p^2 + 2b(t)pr + c(t)r^2] \quad (1)$$

na qual r é uma coordenada generalizada e p é o momentum canonicamente conjugado à coordenada r . Os parâmetros a, b, c são funções do tempo t . Das equações de Hamilton, obtemos a velocidade:

$$\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p} = ap + br \quad (2)$$

e a derivada em relação ao tempo do momentum canônico

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial r} = -bp - cr \quad (3)$$

A equação (2) possibilita-nos expressar o momentum canônico p em função de r e \dot{r} . Substituindo-o em (3), obtemos a equação de movimento do sistema:

$$m\ddot{r} = -\dot{m}\dot{r} - \left(c - \frac{b^2}{a} - \frac{d}{dt} \left(\frac{b}{a} \right) \right) r \quad (4)$$

na qual atribuímos um significado físico para o parâmetro a : $a^{-1}(t) = m(t)$ é a massa dependente do tempo.

A equação (2) oferece-nos um exemplo, em que o momentum canônico p e o momentum cinético $m\dot{r}$ não são iguais. O termo $-\dot{m}\dot{r}$ em (4) origina-se da derivada em relação ao tempo do momentum cinético: $\frac{d}{dt}(m\dot{r}) = m\ddot{r} + \dot{m}\dot{r}$ e representa uma força fictícia F_d . Esta é o produto da variação da massa dependente do tempo ($-\dot{m}$) pela velocidade relativa (\dot{r}) entre o sistema e a massa perdida. No referencial

inercial considerado para descrever o sistema, esta massa perdida está em repouso.

A energia \mathcal{E} do sistema é obtida multiplicando a velocidade \dot{r} pela equação de movimento (4):

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} m \dot{r}^2 + \frac{1}{2} \left(c - \frac{b^2}{a} - \frac{d}{dt} \left(\frac{b}{a} \right) \right) r^2 \quad (5)$$

A energia do sistema com massa variável no tempo não é conservada:

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = \frac{1}{2} m \dot{r}^2 + (-m\dot{r})\dot{r} + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(c - \frac{b^2}{a} - \frac{d}{dt} \left(\frac{b}{a} \right) \right) r^2 \quad (6)$$

Nesta expressão empregamos a equação de movimento (4) e a definição (5). Três termos contribuem para a variação da energia:

(i) a potência $P_{\dot{r}}$, fornecida ao oscilador devido à variação da

massa a velocidade constante: $P_{\dot{r}} = \frac{1}{2} \dot{m} \dot{r}^2$

(ii) a potência dissipada P_d , devido à força fictícia F_d : $P_d = (-m\dot{r})\dot{r}$

(iii) a potência P_r , fornecida ao oscilador devido à variação de

$\left\{ c - \frac{b^2}{a} - \frac{d}{dt} \left(\frac{b}{a} \right) \right\}$ a deslocamento constante: $P_r = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(c - \frac{b^2}{a} - \frac{d}{dt} \left(\frac{b}{a} \right) \right) r^2$

A energia, indicada em (5) se comparada à obtida para o oscilador harmônico O.H., nos leva a definir uma "constante" positiva $K(t)$:

$$K(t) = c(t) - \frac{b^2(t)}{a(t)} - \frac{d}{dt} \left(\frac{b(t)}{a(t)} \right) \quad (7)$$

tal que \mathcal{E} (5) seja a soma da energia cinética com o potencial, na seguinte forma:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} m \dot{r}^2 + \frac{1}{2} K r^2 \quad (8)$$

Podemos reescrever a equação anterior em termos de p e r , empregando a equação (2):

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2m} \left(p + \frac{b}{a} r \right)^2 + \frac{1}{2} K r^2 \quad (9)$$

O oscilador harmônico generalizado será descrito por uma lagrangiana da forma:

$$L = \frac{1}{2} m \dot{r}^2 - \frac{1}{2} K r^2 - \frac{d}{dt} \left[\left(\frac{b}{2a} \right) r^2 \right] \quad (10)$$

obtida da hamiltoniana (1) pela transformação: $L = p \cdot \dot{r} - H$. O momento canônico p pode ser expresso em termos de r e \dot{r} , via equação de Hamilton (2). Consideremos uma nova lagrangiana L'

$$L' = \frac{1}{2} m \dot{r}^2 - \frac{1}{2} K r^2 \quad (11)$$

que difere da lagrangiana L pela derivada total com respeito ao tempo de uma função $\Lambda(r, t)$

$$\Lambda(r, t) = \left(\frac{b(t)}{2a(t)} \right) r^2 \quad (12)$$

As condições de extremo das ações: $S = \int L(r, \dot{r}, t) dt$ e $S' = \int L'(r, \dot{r}, t) dt$ coincidem, de forma que a equação de movimento (4) se mantém inalterada. O termo $\frac{d}{dt} \left(\frac{b}{2a} r^2 \right)$, presente em (10) não altera a "dinâmica" do sistema. As lagrangeanas L e L' o descrevem.

O momentum canônico p' é igual ao momentum cinético:

$$p' = \frac{\partial L'}{\partial \dot{r}} = m \dot{r} \quad , \quad m = m(t) \quad (13)$$

e a variável r' é idêntica à r . A nova hamiltoniana pode ser construída: $H' = p' \cdot r' - L'$, na seguinte forma:

$$H' = \frac{1}{2m} p'^2 + \frac{1}{2} K r^2 \quad (14)$$

Em termos das variáveis canônicas r' e p' , a expressão em (14) corresponde à hamiltoniana conhecida para um oscilador harmônico, no qual a massa m e a constante K são funções do tempo. Comparando (8) com (13) e (14), percebemos a igualdade entre ξ e H' . Outra maneira de se ver a igualdade, consiste em relacionar os momentos canônicos p e p' :

$$p' = p + \left(\frac{b}{a} \right) r \quad (15)$$

e introduzir a expressão de p' (15) em H' (14), reobtendo a energia \mathcal{E} (9).

III.1.2 A Formulação Quântica

A evolução temporal do vetor-estado $|\Psi(t)\rangle$ de um sistema é descrita pela equação de Schrödinger. Impomos que ela seja formalmente invariante sob transformações de Gauge. Introduziremos regras de quantização para as grandezas físicas tratadas anteriormente⁽⁴⁷⁾. Uma grandeza física A definida, no formalismo canônico da mecânica clássica, em termos das variáveis dinâmicas r e p será identificada a um operador hermitiano \hat{A} , na formulação quântica. Segundo estas regras de quantização, identificamos os parênteses de Poisson clássico $\{ \ , \ }$ ao comutador quântico $i [\ , \]$. Os parênteses de Poisson para as variáveis canônicas r e p têm a forma:

$$\{r_i, r_j\} = \{p_i, p_j\} = 0 \quad . \quad \{p_i, r_j\} = \delta_{ij} \quad (16)$$

Associaremos a posição r e o momentum p aos operadores \hat{r} e \hat{p} , respectivamente, de maneira que as componentes destes operadores satisfaçam as relações canônicas de comutação

$$[\hat{r}_i, \hat{r}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad . \quad [\hat{p}_i, \hat{r}_j] = i \delta_{ij} \quad (17)$$

No entanto, o operador \hat{A} não é resultado da simples identificação das variáveis: r e p com os operadores: \hat{r} e \hat{p} , na expressão da grandeza clássica $A(p, r)$. Observemos a hamiltoniana H (1). Ela contém o produto escalar $r \cdot p$, que é comutativo. Ao identificarmos as variáveis clássicas aos operadores, verificamos que: $\hat{r} \cdot \hat{p} \neq \hat{p} \cdot \hat{r}$ e os operadores: $\hat{r} \cdot \hat{p}$ e $\hat{p} \cdot \hat{r}$ não são hermitianos. Logo, é

necessário introduzir regras de simetrização convenientes para \hat{A} .

Por exemplo, o operador associado à r.p será: $\frac{1}{2} (\hat{r}\hat{p} + \hat{p}\hat{r})$.

Na formulação quântica, o hamiltoniano para o oscilador harmônico generalizado (O.H.G.) é definido como

$$\hat{H} = \frac{1}{2} [a(t)\hat{p}^2 + b(t)(\hat{p}\hat{r} + \hat{r}\hat{p}) + c(t)\hat{r}^2] \quad (18)$$

Seguindo o método de quantização canônica, o operador energia \hat{E} será construído a partir de $\hat{C}(\theta)$, substituindo o momento canônico p pelo operador $\hat{p} = i\hbar \nabla_r$

$$\hat{E} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} + \frac{b}{a} \hat{r} \right)^2 + \frac{1}{2} K \hat{r}^2 \quad (19)$$

A equação de autovalores para o operador \hat{E} assume a forma

$$\hat{E} |\Psi_n\rangle = \epsilon_n |\Psi_n\rangle \quad (20)$$

em que as autofunções $|\Psi_n\rangle$ são normalizadas⁽⁴²⁾. Se impusermos que a equação de Schrödinger e a de autovalores para o operador

energia são invariantes sob transformações unitárias: para a

escolha $U(r,t) = \exp(i\Lambda(r,t))$, os operadores \hat{E} e \hat{H} , o estado

$|\Psi\rangle$ e as autofunções $|\Psi_n\rangle$ se transformam segundo as equações:

(I.4.9), (I.4.10), (I.4.11), (I.4.12) e (I.4.13). Os níveis de

energia ϵ_n são invariantes por transformações unitárias e podem

ser caracterizados pela frequência angular $\omega = [K(t) \cdot a(t)]^{1/2}$

da seguinte maneira:

$$\epsilon_n = \hbar\omega(t) \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n: \text{natural, não nulo} \quad (21)$$

Se a função geratriz $\Lambda(r,t)$ é da forma:

$$\Lambda(r,t) = \frac{1}{2} \left(\frac{b(t)}{a(t)} r^2 \right) \quad (22)$$

o operador energia transformado \hat{E}' , segundo (I.3.9), pode ser

expresso como:

$$\hat{E}' = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} K r^2 \quad (23)$$

O momento transformado \hat{p}' está relacionado a \hat{p} , da seguinte maneira:

$$\hat{p}' = \hat{p} + \frac{b}{a} \hat{r} \quad (24)$$

Os autoestados $|\psi'_n\rangle$ do operador $\hat{\xi}'$ são funções normalizadas e reais.

III.1.3 Formulação em que a Hamiltoniana é a energia do sistema

Outra formulação é assumir a hamiltoniana do O.H.G., dependente do tempo (1), como sendo a energia E do sistema. Podemos expressar p em termos de r , \dot{r} a partir da equação (2) e substituí-lo na hamiltoniana (1). Desta maneira, escrevemos a energia $E(t)$ como função das variáveis r e \dot{r}

$$E(t) = \frac{1}{2} m(t) \dot{r}^2 + \frac{1}{2} [r]^2 \quad (25)$$

$[r(t)]$ caracteriza a "constante" do oscilador que, em todo instante, é positiva. Ela é assim definida em termos dos parâmetros

$$[r(t)] = c - \bar{a}^{-1} \cdot b^2 \quad (26)$$

A derivada de $E(t)$ (25) com relação ao tempo

$$\frac{dE(t)}{dt} = \frac{1}{2} \dot{m} \dot{r}^2 + \frac{1}{2} [\dot{r}^2 + \dot{m} \dot{r} \left(\frac{d}{dt} \dot{r} \right) + [r \left(\frac{d}{dt} r \right)] \quad (27)$$

pode ser reescrita em termos da constante $K(t)$

$$\frac{dE(t)}{dt} = \frac{1}{2} \dot{m} \dot{r}^2 + \frac{1}{2} \dot{K} r^2 + (-m \dot{r}) \dot{r} + \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{2} ([r - K] r^2) \right] \quad (28)$$

logo, se compararmos as equações (6) e (7) com (28), verificaremos que esta última corresponde à equação (6), pois a energia $\xi(t)$ (8) está relacionada a $E(t)$ da seguinte forma

$$\xi(t) = E(t) - \frac{1}{2} [(r - K) r^2] \quad (29)$$

No entanto, a derivada de $E(t)$, relativa ao tempo (27), contém membros que não podem ser interpretados fisicamente em termos do operador potência [Apêndice 1] !

A seguir, vamos reescrever $E(t)$ (25) em termos do momentum canônico p (2):

$$E(t) = \frac{1}{2m} \left(p + \frac{b}{a} r^2 \right) + \frac{1}{2} [r^2] \quad (30)$$

III.1.4 A Formulação Quântica

Empregando o método de quantização canônica, construímos o operador energia \hat{E} para o O.H.G. dependente do tempo:

$$\hat{E}(t) = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} + \frac{b}{a} \hat{r} \right) + \frac{1}{2} [\hat{r}^2] \quad \hat{p} = -i\hbar \nabla_r \quad (31)$$

A equação de autovalores para o operador energia \hat{E} :

$$\hat{E} |\varphi_n\rangle = h_n |\varphi_n\rangle \quad (32)$$

define autofunção $|\varphi_n\rangle$ normalizadas^[42]. Os níveis de energia h_n obtem-se:

$$h_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \Omega(t) \quad n: \text{natural, não-nulo} \quad (33)$$

em termos da frequência angular $\Omega(t) = [a(t) \cdot [r(t)]^{1/2}]$, dependente do tempo. Sob uma transformação unitária $U(r,t) = \exp(i\hbar^{-1}\Lambda(r,t))$, na qual $\Lambda(r,t)$ é definida em (22):

(i) o operador energia \hat{E} assume a forma (segundo (I.4.9)):

$$\hat{E}' = \frac{1}{2m} \hat{p}'^2 + \frac{1}{2} [\hat{r}'^2] \quad (34)$$

(ii) e as autofunções reais e normalizadas do operador \hat{E}' são as seguintes (de acordo com (I.4.11)):

$$|\varphi'_n\rangle = e^{i\hbar^{-1} \frac{1}{2} \frac{b(t)}{a(t)} r} |\varphi_n\rangle \quad (35)$$

Os autovalores de E' mantêm-se invariantes sob estas transformações.

III.1.5 A Fase de Berry

A fase de Berry pode ser calculada e comparada para os diferentes tratamentos do problema:

(i) a hamiltoniana H (18) não corresponde ao operador energia (19) do sistema,

(ii) a hamiltoniana H (18) é assumida como o operador energia (31).

(i) Neste tratamento, a função qA_0 (I.4.3), que descreve a diferença entre os operadores \hat{H} e \hat{E} , assume a forma

$$qA_0 = \frac{1}{2} r^2 \frac{d}{dt} \left(\frac{b}{a} \right). \quad (36)$$

Ela está presente na definição invariante da fase de Berry (I.4.6). A derivada com relação ao tempo da fase de Berry pode ser expressa como a soma de dois termos, que segue das equações (I.4.6) e (36)

$$\langle \psi_n | (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0) | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi_n \rangle - \langle \psi_n | \frac{1}{2} r^2 \frac{d}{dt} \left(\frac{b}{a} \right) | \psi_n \rangle \quad (37)$$

O último termo à direita da equação (37) é igual ao elemento de matriz $\langle \psi_n | \frac{\partial \Lambda}{\partial t} | \psi_n \rangle$, cuja função geratriz $\Lambda(r,t)$ foi definida em (22). Podemos reescrever os elementos $\langle \psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi_n \rangle$, utilizando a definição de autofunções transformadas $|\psi'_n\rangle$ (I.4.11):

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi_n \rangle &= i\hbar \langle \psi'_n | e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda} \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} \Lambda} | \psi'_n \rangle = \\ &= \langle \psi_n | \frac{\partial \Lambda}{\partial t} | \psi_n \rangle + i\hbar \langle \psi'_n | \frac{\partial}{\partial t} | \psi'_n \rangle \end{aligned} \quad (38)$$

Escolhemos $|\psi'_n\rangle$ normalizadas à unidade, de maneira que ao elemento

$$\langle \psi'_n | \frac{\partial}{\partial t} | \psi'_n \rangle = - \langle \frac{\partial}{\partial t} | \psi'_n \rangle = - \langle \psi'_n | \frac{\partial}{\partial t} | \psi'_n \rangle^* \quad \text{esteja asso-}$$

ciado um número imaginário "puro". As autofunções $|\psi'_n\rangle$ são reais, o que implica associarmos ao elemento $\langle \psi'_n | \frac{\partial}{\partial t} | \psi'_n \rangle$ um número real.

Uma vez que este produto deve assumir um valor em $\mathbb{R} \text{ e } \mathbb{C}$, logo

$$\langle \psi_n' | \frac{\partial}{\partial t} \psi_n' \rangle = 0 \quad (39)$$

Somando este resultado com a igualdade entre $\langle \psi_n | \frac{\partial \Lambda}{\partial t} | \psi_n \rangle$ e $\langle \psi_n(t) | \frac{1}{2} r^2 \frac{d}{dt} \left(\frac{b}{a} \right) | \psi_n(t) \rangle$, concluímos que para este sistema a fase de Berry γ_n é nula.

Classicamente, havíamos obtido que a hamiltoniana transformada H' (14) (15) é igual a energia ξ (9), tal que a função qA_0 (I.4.3) é nula. Na formulação quântica, o operador H' definido em (I.4.14) é igual ao operador \hat{E} (19), (24). Logo, qA_0' é nulo (I.4.16). A fase de Berry γ_n' é avaliada para os autoestados $|\psi_n\rangle$ (25). Comparando a definição (I.4.6) com as expressões: (39) e $qA_0' = 0$, deduzimos: $\gamma_n'(t) = 0$. Já era esperado que a fase de Berry em sua formulação invariante resultasse nula para o sistema transformado (I.4.26).

(ii) Nesta formulação, assumimos que qA_0 é nula. A fase de Berry $\Gamma_n(t)$ é calculada para os autoestados $|\varphi_n(t)\rangle$ (42) do operador \hat{E} :

$$\begin{aligned} \Gamma_n(t) &= \int_0^t dt' \langle \varphi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \varphi_n \rangle = \int_0^t dt' \frac{1}{2} \left(\frac{d}{dt'} \left(\frac{b}{a} \right) \right) \langle \varphi_n | r^2 | \varphi_n \rangle \\ &= (n + \frac{1}{2}) \int_0^t dt' \frac{(b\dot{a} - \dot{b}a)}{a\Omega} = (n + \frac{1}{2}) \int_0^t \frac{1}{2} \frac{(b\dot{a} - \dot{b}a)}{a} (ac - b^2)^{-1/2} \\ &= (n + \frac{1}{2}) \int_0^t dt' \frac{(a\dot{b} - \dot{a}b)}{2a\sqrt{ac - b^2}} \quad (40) \end{aligned}$$

o valor esperado de r^2 assume a forma: $\langle \varphi_n | r^2 | \varphi_n \rangle = (n + \frac{1}{2}) a\Omega^{-1}$ onde Ω é definida em (33).

A fase de Berry para os autoestados transformados $|\varphi_n'\rangle$ (35):

$$\Gamma_n'(t) = \int_0^t dt' \langle \varphi_n' | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - qA_0' | \varphi_n' \rangle \quad (41)$$

contém o potencial escalar qA_0 . Este é expresso em função de qA_0 e do gerador $\Lambda(r,t)$ (22), presentes na relação (I.4.16) ($\mu = 0$). Nesta formulação, assumimos que qA_0 é nula para o sistema, e o potencial qA_0 se reduz a:

$$qA_0' = -i\hbar e^{\frac{i}{\hbar}\Lambda} \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar}\Lambda} = -\frac{\partial \Lambda(r,t)}{\partial t} \quad (42)$$

Já argumentamos, anteriormente, que a escolha das autofunções $|\psi_n'\rangle$ reais e normalizadas implica em $\langle \psi_n' | \frac{\partial}{\partial t} | \psi_n' \rangle$ nulo.

O integrando de $\Gamma_n'(t)$ (41) contém o potencial transformado (42)

$$\begin{aligned} \Gamma_n'(t) &= \int_0^t \langle \psi_n' | \frac{\partial}{\partial t'} \left(\frac{b}{2a} r \right) | \psi_n' \rangle dt' = \\ &= \frac{1}{2} \int_0^t \left[\frac{\partial}{\partial t'} \left(\frac{b}{a} \right) \right] \langle \psi_n | r^2 | \psi_n \rangle dt' \end{aligned} \quad (43)$$

Comparando (43) com (40), concluímos pela igualdade $\Gamma_n(t) = \Gamma_n'(t)$

III.1.6 As Amplitudes de Probabilidade

A equação de movimento para a amplitude de probabilidade $\tilde{a}_n(t)$ contém a amplitude de transição $\langle \psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0 | \psi_l \rangle$ para estados $|\psi_l\rangle$ $l \neq n$. Para o problema do oscilador harmônico generalizado e do oscilador harmônico dependente do tempo, podemos calcular as amplitudes de transição entre diferentes estados. Vamos distinguir duas formulações e expressar as equações de movimento para as amplitudes de probabilidade na representação de interação:

(1) a hamiltoniana H (18) não corresponde ao operador energia (19) do sistema.

As amplitudes de transição são calculadas em termos das autofunções $|\psi_n(t)\rangle$ (20), do potencial escalar qA_0 (36) e da constante k (7):

$$\langle \Psi_n | (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0) | \Psi_\ell \rangle = \frac{i}{8} \left(\frac{\dot{k}}{k} - \frac{\dot{a}}{a} \right) \left\{ [(n+1)(n+2)]^{1/2} \delta_{n+2,\ell} - [n(n-1)]^{1/2} \delta_{n-2,\ell} \right\} \quad (44)$$

Como esperávamos, a amplitude (44) se anula para $\ell = n$.

Obtemos uma equação diferencial acoplada para a amplitude $\tilde{a}_n(t)$, introduzindo (44) em (I.4.21). A equação reduz-se a dois termos:

$$i \frac{d}{dt} \tilde{a}_n(t) = \frac{i}{8} \left(\frac{\dot{k}}{k} - \frac{\dot{a}}{a} \right) \left[\sqrt{(n-1)n} \tilde{a}_{n-2} \exp(2i \int_0^t \sqrt{aK} dt') + \sqrt{(n+1)(n+2)} \tilde{a}_{n+2} \exp(-2i \int_0^t \sqrt{aK} dt') \right] \quad (45)$$

Os autovalores ϵ_n (21) podem ser reescritos como $\epsilon_n = \hbar \sqrt{aK} (n + \frac{1}{2})$. A derivada da fase de Berry $\dot{\gamma}_n(t) = \langle \Psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0 | \Psi_n \rangle$ (37) é nula e as amplitudes $\tilde{a}_{n-2} = 0$, se $n - 2 < 0$. A amplitude de probabilidade para o estado n está acoplada às amplitudes para os estados $n - 2$ e $n + 2$. Se os parâmetros a, b, c variam lentamente com o tempo, as amplitudes de transição podem ser desconsideradas e $\tilde{a}_n(t)$ é uma constante. As amplitudes de probabilidade $Q_n(t)$ na representação de Schrödinger variam da seguinte maneira:

$$Q_n(t) = \text{const.} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t (n + \frac{1}{2}) \sqrt{aK} dt' \right\} \quad (46)$$

(ii) a hamiltoniana H (18) é o operador energia E do sistema ($qA_0 = 0$).

Expressamos a amplitude de transição entre os autoestados $|\varphi_k\rangle$ e $|\varphi_n\rangle$ sob a forma:

$$\langle \varphi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_k \rangle = \left[\frac{i}{8} \left(\frac{\dot{c}}{c} - \frac{\dot{a}}{a} \right) + \dot{\Gamma}_0 \right] [(n+1)(n+2)]^{1/2} + [(n-1)(n)]^{1/2} \left[\frac{i}{8} \left(\frac{\dot{a}}{a} - \frac{\dot{c}}{c} \right) + \dot{\Gamma}_0 \right] + 2 \left(n + \frac{1}{2} \right) \dot{\Gamma}_0 \cdot \delta_{nk} \quad (47)$$

onde os três termos contêm a derivada da fase de Berry para o autoestado fundamental ($n = 0$) (40)

$$\dot{\Gamma}_0(t) = \frac{ab - \dot{a}b}{4a\sqrt{ac - b^2}} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{a}{c}} \cdot \frac{d}{dt} \left(\frac{b}{a} \right) \quad (48)$$

Para $n = l$, reobtemos a expressão da fase de Berry (40). Introduzindo (47) e (48) na equação (I.4.21), conseguimos uma equação diferencial acoplada para a amplitude de probabilidade $\tilde{a}_n(t)$:

$$i \frac{d}{dt} \tilde{a}_n(t) = \left\{ \left[\frac{i}{8} \left(\frac{\dot{L}}{L} - \frac{\dot{a}}{a} \right) - \dot{\Gamma}_0 \right] \sqrt{n(n-1)} \cdot \exp(2i \left[\int_0^t \sqrt{a\Gamma} dt' - 2\Gamma_0 \right]) \right\} \tilde{a}_{n-2} +$$

$$\left\{ \left[\frac{i}{8} \left(\frac{\dot{a}}{a} - \frac{\dot{L}}{L} \right) - \dot{\Gamma}_0 \right] \sqrt{(n+1)(n+2)} \exp(2i \left[2\Gamma_0 - \int_0^t \sqrt{a\Gamma} dt' \right]) \right\} \tilde{a}_{n+2} \quad (49)$$

No caso da evolução não-adiabática do sistema, a amplitude para o autoestado n está acoplada a duas amplitudes, relativas aos autoestados $n - 2$ e $n + 2$. Em (49), os coeficientes $\tilde{a}_{n-2}(t)$ são nulos para $n - 2 < 0$ e o nível de energia h_n (33) é reescrito em termos dos parâmetros: $h_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \sqrt{a\Gamma}$. Se $\Gamma_0(t) = 0$ e trocarmos L por K , de (49) obtemos formalmente (45).

Quando variamos os parâmetros lentamente no tempo, os termos relativos às amplitudes de transição em (49) podem ser desprezados e portanto, $\tilde{a}_n(t)$ é uma constante. Consequentemente, a amplitude de probabilidade $a_n(t)$ na representação de Schrödinger, varia no tempo, como:

$$a_n(t) = \tilde{a}_n(t) \cdot \exp \left\{ -i \int_0^t \sqrt{a\Gamma} \left(n + \frac{1}{2} \right) dt' \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{i}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \int_0^t \sqrt{\frac{a}{L}} \frac{d}{dt'} \left(\frac{b}{a} \right) dt' \right\} \quad (50)$$

III.1.7 A Fase Total

A fase total Φ_n , definida pela soma da fase de Berry e da dinâmica, deve ser invariante sob transformações unitárias (I.4) visto que cada uma é invariante, separadamente. Se assumirmos que a hamiltoniana H (18) é o operador energia \hat{E} do sistema,

a fase total Φ_n^E consiste na soma da fase dinâmica $-(n+\frac{1}{2})\int_0^t \Omega dt'$ (34) com a de Berry: $(n+\frac{1}{2})\int_0^t \frac{a}{2\Omega} \frac{d}{dt'}\left(\frac{b}{a}\right) dt'$ (40)

$$\Phi_n^E = (n+\frac{1}{2}) \left\{ -\int_0^t \Omega(t') dt' + \frac{1}{2} \int_0^t a \Omega^{-1} \frac{d}{dt'}\left(\frac{b}{a}\right) dt' \right\} \quad (51)$$

Vamos definir o parâmetro $\xi(t)$:

$$\xi(t) = a \cdot \omega^{-2} \cdot \frac{d}{dt}\left(\frac{b}{a}\right) \quad (52)$$

no sentido de expressar a frequência Ω (33) em função de $\omega(t)$ (21)

$$\Omega(t) = \omega(t) \sqrt{1 + \xi(t)} \quad (53)$$

Podemos reescrever a fase total Φ_n^E (51), introduzindo $\omega(t)$ e $\xi(t)$ na seguinte forma:

$$\Phi_n^E = - (n+\frac{1}{2}) \int_0^t \omega \left[\sqrt{1+\xi} - \frac{1}{2} \xi \sqrt{(1+\xi)^{-1}} \right] dt' \quad (54)$$

A variação lenta dos parâmetros no tempo, corresponde a grandeza $\xi \ll 1$ (limite adiabático). Nestas condições, podemos expandir a função $\sqrt{\quad}$, presente na equação (54), em potências de ξ .

Obtém-se assim a expressão para a fase total:

$$\Phi_n^E = - (n+\frac{1}{2}) \int_0^t \omega(t') \left[1 + \frac{1}{8} \xi^2 - \frac{1}{8} \xi^3 + \dots \right] dt' \quad (55)$$

A fase Φ_n^E resulta da soma da fase dinâmica invariante $-(n+\frac{1}{2})\int_0^t \omega(t') dt'$ (21) com a de Berry invariante $\gamma_n = 0$

$$\Phi_n^E = - (n+\frac{1}{2}) \int_0^t \omega(t') dt' \quad (56)$$

Comparando (55) com (56), verificamos que a fase total Φ_n^E pode ser expressa em função da invariante Φ_n^E

$$\Phi_n^E(t) = \Phi_n^E - (n+\frac{1}{2}) \int_0^t \omega(t') \left[1 + \frac{1}{8} \xi^2 - \frac{1}{8} \xi^3 + \dots \right] dt' \quad (57)$$

A diferença entre os integrandos dessas fases é da ordem de ξ^2 . Variando os parâmetros a, b e c lentamente no tempo, os termos de segunda ordem ou superiores em ξ serão desprezados. A equação (57) concorda com as considerações presentes em

(I.4).

Neste exemplo, o oscilador harmônico generalizado (O.H.G.) ilustra o tratamento no qual a fase de Berry e os níveis de energia são separadamente invariantes, sob transformações unitárias⁽⁴⁾. Quando distinguimos a hamiltoniana da energia do O.H.G., a fase de Berry invariante é nula. Se incorretamente assumimos a energia como o hamiltoniano (18) de O.H.G., a fase de Berry não se anula, mas mantém-se invariante sob transformações unitárias. No limite adiabático, a fase total para os diferentes tratamentos coincidem.

III.2 Partícula de Spin $1/2$ na presença de um campo magnético dependente do tempo (tratamento exato)^[89,44]

III.2.1 Introdução

Consideremos uma partícula de spin $1/2$ na presença de um campo magnético B que varia com o tempo. O campo $B(t)$ pode ser expresso em coordenadas esféricas, nas quais $B(t) = |B(t)|$ é a magnitude do vetor, $\theta(t)$: o ângulo polar e $\varphi(t)$: o ângulo azimutal desse, na seguinte forma:

$$B(t) = (B \sin \theta \cos \varphi, B \sin \theta \sin \varphi, B \cos \theta) \quad (1)$$

A equação de Schrödinger para o estado $|\Psi(t)\rangle$ da partícula é

$$H|\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle \quad (2)$$

O hamiltoniano em (2) é dado pelo momentum μB do elétron

$$\hat{H} = -\mu B \cdot \sigma \quad (3)$$

e das matrizes de Pauli $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$. Reescrevemos o hamiltoniano $H(t)$, introduzindo a expressão do vetor $B(t)$ em coordenadas esféricas (1)

$$\hat{H}(t) = -\mu B \left\{ \cos \theta \sigma_3 + \sin \theta \left(e^{-i\varphi(t)} \sigma_+ + e^{i\varphi(t)} \sigma_- \right) \right\} \quad (4)$$

no qual definimos

$$\sigma_{\pm} = \frac{1}{2} (\sigma_1 \pm i\sigma_2) \quad (5)$$

O tempo t parametriza $H(t)$ do sistema. O hamiltoniano (2) consiste num potencial e o identificamos com a energia do sistema. Os níveis de energia E_n são obtidos da equação de autovalores para o operador \hat{E} :

$$\hat{E} |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle \quad (6)$$

$|\Psi_n\rangle$ é o autoestado da energia correspondente a E_n . Efetuando a

escolha dos autovalores α_+ e α_- do operador σ_3

$$\sigma_3 |\alpha_+\rangle = |\alpha_+\rangle \quad \sigma_3 |\alpha_-\rangle = -|\alpha_-\rangle \quad (7)$$

como base para o espaço dos autovetores do operador energia \hat{E} , expressamos, os autovalores e autovetores desse operador, a saber

$$E_1 = -\mu B(t) \quad \psi_1 = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\varphi} \alpha_+ + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \alpha_- \quad (8)$$

$$E_2 = +\mu B(t) \quad \psi_2 = -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\varphi} \alpha_+ + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \alpha_- \quad (9)$$

A diferença entre os níveis de energia é $2\mu B$. A fase de Berry, em sua formulação invariante de Gauge (I.4.6) tem a derivada em relação ao tempo expressa na forma

$$\dot{\gamma}_n(t) = \langle \psi_n | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0 \right) | \psi_n \rangle \quad (10)$$

O potencial escalar qA_0 (I.4.3) representa a diferença entre o hamiltoniano e o operador energia do sistema. Neste problema, esse potencial é nulo! Ao introduzirmos os estados $|\psi_1\rangle$ (8) e $|\psi_2\rangle$ (9) no elemento $\dot{\gamma}_n$ (10), obtemos respectivamente:

$$\dot{\gamma}_1(t) = \dot{\varphi} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (11)$$

$$\dot{\gamma}_2(t) = \dot{\varphi} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (12)$$

$\dot{\varphi}$ e θ são funções do tempo. Observemos que as derivadas temporais da fase de Berry foram obtidas sem hipóteses quanto ao caráter adiabático da variação do hamiltoniano (3). Em outras palavras, as expressões (11) e (12) são válidas nos casos adiabáticos e não-adiabáticos.

O caso adiabático caracteriza-se pela lenta variação no tempo do ângulo polar $\theta(t)$. As fases de Berry, neste caso, são obtidas por quadratura das expressões (11) e (12), resultando

$$\gamma_1(t) = [\varphi(t) - \varphi(0)] \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (13)$$

$$\gamma_2(t) = [\varphi(t) - \varphi(0)] \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (14)$$

Estas dependem da diferença entre o ângulo azimutal no instante t e no inicial ($t = 0$). Logo, independem de como o ângulo azimutal varia no tempo. Neste intervalo (entre 0 e t) o ângulo polar $\theta(t)$ é considerado constante. No período T do ângulo azimutal, temos $\varphi(T) - \varphi(0) = 2\pi$. Logo, reescrevemos (13) e (14) nas formas conhecidas

$$\gamma_1(T) = \pi(1 + \cos\theta) = \frac{1}{2}(4\pi - \Omega) \quad (15)$$

$$\gamma_2(T) = \pi(1 - \cos\theta) = \frac{1}{2}\Omega \quad (16)$$

$\gamma_2(T)$ é proporcional ao ângulo sólido Ω , delimitado pelo campo magnético $B(t)$ e $\gamma_1(T)$ proporcional ao ângulo sólido complementar.

No caso particular em que B , θ e $\dot{\varphi}(t) = \omega$ são constantes no tempo, a fase total $\Phi_n = \gamma_n^d + \gamma_n$ (I.4.29) (onde γ_n^d corresponde à fase dinâmica e γ_n à fase geométrica) é dada por

$$\Phi_1(t) = \left\{ -(-\mu B) + \omega \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \right\} t \quad (17)$$

(para o estado fundamental)

$$\Phi_2(t) = \left\{ -(\mu B) + \omega \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \right\} t \quad (18)$$

(para o estado excitado)

III.2.2 A Introdução de um Referencial Girante

Analisemos o problema de uma partícula de spin $1/2$ na presença de um campo magnético $B(t)$ que varia com o tempo, a saber

$$\mathbf{B} = (B \sin \theta \cos \omega t, B \sin \theta \sin \omega t, B \cos \theta), \quad \mathbf{B}: \text{constante}; \quad \theta: \text{constante} \quad (19)$$

Agora, o campo magnético independe do tempo na direção OZ. A projeção de \mathbf{B} no plano XY roda em torno de OZ, com frequência angular constante ω . Este sistema pode ser descrito por meio de um hamiltoniano H , dependente do tempo, obtida de (4)

$$\hat{H}(t) = -\mu B \left\{ \cos \theta \sigma_3 + \sin \theta \left[e^{-i\omega t} \sigma_+ + e^{i\omega t} \sigma_- \right] \right\} \quad (20)$$

O operador \hat{E} do sistema corresponde ao hamiltoniano $\hat{H}(t)$ (20). Os autovalores e correspondentes autovetores do operador \hat{E} são definidos pela equação (6). Eles são expressos em função de (8) e (9) por

$$E_1 = -\mu B \quad |\psi_1\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\omega t} \alpha_+ + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \alpha_- \quad (21)$$

$$E_2 = \mu B \quad |\psi_2\rangle = -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\omega t} \alpha_+ + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \alpha_- \quad (22)$$

A equação de Schrödinger para o estado $|\psi(t)\rangle$ da partícula se obtém introduzindo o hamiltoniano $\hat{H}(20)$ na equação (2).

Embora se trate de um sistema em que o potencial é dependente do tempo, determinamos de maneira exata os autoestados do operador energia \hat{E} , sem ter que resolvê-lo por expansão perturbativa. Considerando um referencial em que o campo magnético \mathbf{B} é constante, podemos resolver o problema de autovalores para o sistema de dois níveis na presença deste campo. A seguir, expressaremos os autoestados no referencial de laboratório, em que o campo varia com o tempo (19). Por uma transformação unitária, dependente do tempo

$$U(t) = e^{i\frac{\omega}{2} t \sigma_3} \quad (23)$$

o estado $|\psi'\rangle$ da partícula, no referencial girante, será

relacionado a $|\psi(t)\rangle$, no referencial de laboratório (I.4.12) da seguinte forma

$$|\psi'(t)\rangle = U(t) |\psi(t)\rangle \quad (24)$$

Vamos admitir que, a equação de Schrödinger (2) expressa no referencial de laboratório mantém-se formalmente invariante sob uma transformação $U(t)$ (I.4.13). O hamiltoniano transformado (I.4.14) é obtido de H (20). Este novo hamiltoniano é independente do tempo e assume a forma

$$\hat{H}' = -\mu B \left\{ \cos \theta \sigma_3 + \sin \theta [\sigma_+ + \sigma_-] \right\} - \frac{\omega}{2} \sigma_3 \quad (25)$$

Supondo que a equação de autovalores para o operador $\hat{\mathcal{E}}$ se mantenha formalmente invariante, o operador $\hat{\mathcal{E}}'$ se transforma da seguinte maneira (I.4.9):

$$\hat{\mathcal{E}}' = U \hat{\mathcal{E}} U^\dagger = -\mu B \left\{ \cos \theta \sigma_3 + \sin \theta [\sigma_+ + \sigma_-] \right\} \quad (26)$$

e os autoestados $|\psi'_n(t)\rangle$ se modificam como $|\psi_n(t)\rangle$ (I.4.12) e (I.4.11).

A condição anterior, expressa os $|\psi'_n(t)\rangle$, resulta

$$|\psi'_1(t)\rangle = e^{i\frac{\omega t}{2}} \left\{ \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \alpha_+ + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \alpha_- \right\} \quad (27)$$

$$|\psi'_2(t)\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}} \left\{ -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \alpha_+ + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \alpha_- \right\} \quad (28)$$

onde os autoestados $|\psi_n(t)\rangle$ são dados em (21) e (22). Os autovalores ϵ_n (21) e (22) são constantes e mantêm-se invariantes sob transformações unitárias $U(t)$. Sob estas o hamiltoniano e o operador energia se transformam de maneiras diversas (I.4.14) e (I.4.9). Comparando a hamiltoniana (25) e a energia (26) do sistema, no referencial girante, percebemos que o potencial qA'_0 (I.4.3) não é nulo, mas assume a forma:

$$qA'_0 = -\frac{\omega}{2} \sigma_3 \quad (29)$$

A fase de Berry tem a derivada em relação ao tempo invariante por transformações unitárias (I.4.17). Basta introduzir na definição (10) os autoestados $|\psi_n'\rangle$ (27) e (28) e o potencial $\varphi A_0'$ (29) para reobtermos: $\dot{\gamma}_n(t) = \frac{\omega}{2} - \langle \psi_n' | -\frac{\omega}{2} \sigma_3 | \psi_n' \rangle$ expressa em (11) e (12) ($\dot{\psi} = \omega$).

III.2.3 Formulações em que a Hamiltoniana é o Operador Energia, no referencial girante^[48]

Se assumirmos que a hamiltoniana \hat{H}' (25) é o operador energia \hat{E} do sistema, no referencial girante, verificamos que a fase de Berry e a diferença entre os níveis de energia se modificam em relação ao previsto no referencial de laboratório. As autoenergias h_n da partícula são determinadas pela equação de de autovalores para o operador \hat{E} (25):

$$\hat{E} |\phi_n(t)\rangle = h_n |\phi_n(t)\rangle \quad (30)$$

Expressamos, a seguir, os autovetores $|\phi_n(t)\rangle$ deste operador, na base dos autovetores do operador σ_3 , e os respectivos autovalores h_n :

$$h_1 = -\Omega$$

$$\phi_1(t) = \frac{e^{-i\frac{\omega}{2}t}}{\sqrt{2\Omega}} \left\{ \sqrt{(\omega_0 + \frac{\omega}{2}) + \Omega} \alpha_+ + \frac{\omega_1}{\sqrt{(\omega_0 + \frac{\omega}{2}) + \Omega}} \alpha_- \right\} \quad (31)$$

$$h_2 = \Omega$$

$$\phi_2(t) = \frac{e^{-i\frac{\omega}{2}t}}{\sqrt{2\Omega}} \left\{ \frac{-\omega_1}{\sqrt{(\omega_0 + \frac{\omega}{2}) + \Omega}} \alpha_+ + \sqrt{(\omega_0 + \frac{\omega}{2}) + \Omega} \alpha_- \right\} \quad (32)$$

As frequências ω_0 , ω_1 e Ω são definidas:

$$\omega_0 = \mu B \cos \theta \quad (33)$$

$$\omega_1 \equiv \mu B \sin \theta \quad (34)$$

$$\Delta \Omega^2 = \left[\left(\omega_0 + \frac{\omega}{2} \right)^2 + \omega_1^2 \right] \quad (35)$$

A diferença entre os níveis de energia dos dois estados é dada por $2 \Delta \Omega$, que difere do obtido no referencial de laboratório (21), (22). A derivada da fase de Berry $\dot{\Gamma}_n$ nesta formulação é a mesma para ambos os estados. Nós a obtemos, substituindo os autovetores $|\phi_n(t)\rangle$ (31) e (32) na definição (10) e recordando que o potencial qA'_0 é nulo

$$\dot{\Gamma}_n = \langle \phi_n | i \hbar \frac{\partial}{\partial t} | \phi_n \rangle = \hbar \frac{\omega}{2} \quad (36)$$

III.2.4 A Fase Total

A fase total adquirida pelo autoestado $|\psi_n^i(t)\rangle$, durante sua evolução temporal, coincide com a prevista no referencial de laboratório (17) e (18). Este resultado decorre da invariância da fase de Berry e da fase dinâmica, sob transformações unitárias, separadamente. A fase total $\Phi_n^{(H' \neq E')}$ (formulação em que $\hat{H}' \neq \hat{E}'$) para o estado fundamental é dada (17)

$$\Phi_1^{(H' \neq E')} = \left\{ -(\mu B) + \omega \cos^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right\} t \quad (37)$$

e para o estado excitado é indicada (18)

$$\Phi_2^{(H' \neq E')} = \left\{ -(\mu B) + \omega \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \right\} t \quad (38)$$

No entanto, na formulação em que se assume $\hat{H}' = \hat{E}$, a fase de Berry $\Gamma_n = \int_0^t \dot{\Gamma}_n dt$ e a dinâmica $\Gamma_n^d = \int_0^t h_n(t') dt'$ (os autovalores h_n foram obtidos em (31) e (32)) não coincidem com as fases calculadas no referencial de laboratório (dependem da escolha de $U(t)$). A fase total $\Phi^{(H' = E)}$, (formulação em que $H' = \hat{E}$) para o estado fundamental

é dada

$$\Phi_1^{(H'=E)} = - \left(-\Omega - \frac{\omega}{2} \right) t \quad (39)$$

e para o estado excitado:

$$\Phi_2^{(H'=E)} = - \left(\Omega - \frac{\omega}{2} \right) t \quad (40)$$

Quando a frequência Ω é expressa em função de ω_0 , ω e ω_1 (33,34,35), a fase total $\Phi^{(H'=E)}$ para o estado fundamental (39) é indicada

$$\Phi_1^{(H'=E)} = \left\{ \sqrt{\left(\omega_0 + \frac{\omega}{2}\right)^2 + \omega_1^2} + \frac{\omega}{2} \right\} t \quad (41)$$

e para o estado excitado (40):

$$\Phi_2^{(H'=E)} = \left\{ -\sqrt{\left(\omega_0 + \frac{\omega}{2}\right)^2 + \omega_1^2} + \frac{\omega}{2} \right\} t \quad (42)$$

Quando expressa em termos de μB ($\mu B = \sqrt{\omega_1^2 + \omega_0^2}$), a frequência Ω (35) apresenta a seguinte forma: $\Omega = \mu B \sqrt{1 + \frac{(\omega_0 + \omega/4)}{(\mu B)^2}}$.

Expandindo a frequência em série de potências, reescrevemos a fase total $\Phi_n^{(H'=E)}$ (41) e (42)

$$\Phi_1^{(H'=E)} = \left\{ \mu B \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\omega\omega_0 + \omega^2/4}{(\mu B)^2} \right) + \dots \right] + \frac{\omega}{2} \right\} t \quad (43)$$

e

$$\Phi_2^{(H'=E)} = \left\{ -\mu B \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_0\omega + \omega^2/4}{(\mu B)^2} \right) + \dots \right] + \frac{\omega}{2} \right\} t \quad (44)$$

No limite adiabático: $\omega \ll \omega_0$, termos de ordem superior em ω podem ser omitidos na expressão de $\Phi_n^{(H'=E)}$ e assim obtemos, a partir das expressões anteriores:

$$\Phi_1^{(H'=E)} = \left\{ \mu B + \frac{1}{2} (1 + \cos \theta) \right\} t \quad (45)$$

e

$$\Phi_2^{(H'=E)} = \left\{ -\mu B + \frac{1}{2} (1 - \cos \theta) \right\} t \quad (46)$$

Recordando as identidades trigonométricas: $\cos^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) = \frac{1}{2} (1 + \cos \alpha)$,

$\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) = \frac{1}{2}(1 - \cos\alpha)$, e comparando (45) com (37), (46) com (38), percebemos que, no limite adiabático ($\omega \ll \omega_0$) reobtemos: $\Phi_n^{(H'=E)} = \Phi_n^{(H'+E')}$. No entanto, a fase de Berry e a diferença entre os níveis de energia do sistema não são iguais para as duas formulações, até mesmo no limite adiabático. Verificaremos que a fase de Berry está presente da probabilidade do sistema estar em um autoestado do operador \hat{C} ou de spin S.

III.2.5 Probabilidade do sistema estar em um autoestado do operador energia

A seguir, vamos calcular a probabilidade do sistema estar em um autoestado do operador \hat{C} , para o sistema preparado inicialmente:

- (i) no estado fundamental do sistema;
- (ii) no autoestado "up" do operador de spin.

Na prática, resolveremos as equações de movimento para as amplitudes de probabilidade $a_n(t)$, no caso não-adiabático, mas para um campo magnético $B(t)$ que varia como expresso em (19), ou seja, um campo que varia harmonicamente. Em um instante t , a amplitude de probabilidade de encontrar a partícula com spin em um autoestado $|\psi_n(\omega)\rangle$ (21) (22), é definida em (I.1.3) (para $n = 1, 2$). Os autoestados dependem explicitamente do tempo por meio do ângulo azimutal $\varphi(t) = \omega t$. A amplitude $a_n(t)$ satisfaz a equação de movimento (I.1.5), que acopla dois autoestados. Sendo a hamiltoniana (20) igual ao operador energia \hat{C} , o potencial qA_0 é nulo. As amplitudes de transição entre os autoestados são dadas por

$$\langle \psi_1(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi_2(t) \rangle = \langle \psi_2(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi_1(t) \rangle = -\frac{\hbar}{2} \omega \sin\theta \quad (47)$$

As derivadas temporais das fases de Berry foram obtidas em (11) e (12) ($\dot{\varphi} = \omega$). Reunindo os termos (as amplitudes de transição, a derivada temporal da fase de Berry e os autovalores do operador $\hat{\xi}$ (21), (22)), indicamos as seguintes equações para as amplitudes de probabilidade:

$$i \dot{a}_1(t) - \left[-\mu B - \omega \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] a_1(t) = \left(\frac{\omega}{2} \sin\theta\right) a_2(t) \quad (48)$$

$$i \dot{a}_2(t) - \left[\mu B - \omega \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] a_2(t) = \left(\frac{\omega}{2} \sin\theta\right) a_1(t) \quad (49)$$

Estas equações diferenciais, lineares e acopladas podem ser resolvidas, introduzindo o "fator integrante", de modo que as soluções tenham a forma

$$a_1(t) = e^{i\frac{\omega}{2}t} \left\{ A_1 \cos(\Omega t) + D_1 \sin(\Omega t) \right\} \quad (50)$$

$$a_2(t) = e^{+i\frac{\omega}{2}t} \left\{ A_2 \cos(\Omega t) + D_2 \sin(\Omega t) \right\} \quad (51)$$

(A_1, D_1, A_2, D_2 são constantes complexas e a frequência Ω é definida em (35)). Os coeficientes A_1, D_1, A_2 e D_2 devem observar certas condições, de maneira que as amplitudes a_1 e a_2 em (50) e (51) satisfaçam as equações diferenciais (48) e (49), respectivamente. Essas condições são expressas pelas seguintes equações

$$\frac{1}{2} \omega (\sin\theta) A_2 = \left(\mu B + \frac{\omega}{2} \cos\theta\right) A_1 + i\Omega D_1 \quad (52)$$

$$\frac{1}{2} \omega (\sin\theta) A_1 = -\left(\mu B + \frac{\omega}{2} \cos\theta\right) A_2 + i\Omega D_2 \quad (53)$$

Os coeficientes A_n, D_n ($n = 1, 2$) são determinados, especificando-se as condições iniciais em que foi preparado o sistema.

(1) Sistema inicialmente preparado no estado fundamental

Consideremos uma amostra contendo partículas de spin $1/2$. Sua temperatura T é mantida bem abaixo de $2\mu B$ (diferença entre os níveis de energia do sistema). Nessas condições, estamos diminuindo a probabilidade de transição para o estado excitado do sistema de 2 níveis, devido à influência térmica. Quando a configuração de equilíbrio é estabelecida, as amplitudes iniciais ($t = 0$) são

$$a_1(0) = 1 \quad . \quad a_2(0) = 0 \quad (54)$$

que refletem máxima probabilidade para o sistema estar no estado fundamental. Introduzindo as amplitudes iniciais nas equações que as relacionam aos coeficientes A_n, D_n (50) (51), concluímos

$$A_1 = 1 \quad A_2 = 0 \quad (55)$$

Da equação (53) que relaciona os coeficientes A_1, A_2 e D_2 , obtemos a forma desse último

$$D_2 = -i\omega\mu B \cdot (2\Omega)^{-1} \quad (56)$$

A amplitude $a_2(t)$ obtemos, substituindo em (51) as expressões para D_2 (56) e A_2 (55). A probabilidade $P_2^{(1)}(t)$ de encontrar a partícula com spin $1/2$ no estado excitado 2, no instante t , é por definição

$$P_2^{(1)}(t) = |a_2(t)|^2 = \left[\frac{\omega \cdot \omega_1}{2\Omega(\mu B)} \right]^2 \sin^2(\Omega t) \quad (57)$$

A probabilidade $P_1^{(1)}(t)$ de encontrar o sistema no estado fundamental 1, no instante t , é obtida pelo coeficiente $A_1 = 1$ (55) e de D_1 (52)

$$D_1 = \Omega^{-1} \cdot i \left(\mu B + \frac{\omega}{2} \cos \theta \right) \quad (58)$$

Introduzindo-os na expressão da amplitude $a_1(t)$ (50), expressamos:

$$P_1^{(1)}(t) = |a_1(t)|^2 = 1 - \left[\frac{\omega \cdot \omega_1}{2\Omega(\mu B)} \right]^2 \sin^2(\Omega t) \quad (59)$$

como sendo $P_1^{(1)} = 1 - P_2^{(1)}$. Essas probabilidades podem ser "medidas" por

meio de instrumentos de espectroscopia.

(ii) Sistema preparado no estado Spin UP ↑

Consideremos uma amostra contendo partículas de spin 1/2, sujeitas a um campo magnético muito intenso na direção OZ. O sistema tenderá à configuração dos spins paralelos à direção do campo aplicado. Em $t = 0$, $|\psi(0)\rangle$ do sistema, preparado no estado de spin up, (representado pelo autoestado α_+) é expresso

$$|\psi(0)\rangle = a_1(0) |\psi_1(0)\rangle + a_2(0) |\psi_2(0)\rangle = |\alpha_+\rangle \quad (60)$$

Na expressão anterior, o estado inicial $|\psi(0)\rangle$ é a combinação dos autoestados do operador energia \hat{E} . Supomos formarem uma base completa para o espaço de Hilbert do sistema. Os autovetores da base foram obtidos em (21) e (22). Quando introduzimos as suas expressões na equação (60) para $|\psi(0)\rangle$, obtemos uma equação para cada componente do spinor $|\psi(t)\rangle$

$$a_1(0) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - a_2(0) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = 1 \quad (61)$$

e

$$a_2(0) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) + a_2(0) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) = 0 \quad (62)$$

Resolvendo-as, concluímos

$$a_1(0) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad \cdot \quad a_2(0) = -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (63)$$

Comparando as expressões (63) das amplitudes, no instante $t = 0$, com as soluções em (50) e (51), percebemos que $a_1(0) = A_1$ e $a_2(0) = A_2$.

Ao substituir esses coeficientes em (52) e (53), resultam expressões para os coeficientes D_1 e D_2 , respectivamente:

$$D_1 = i \frac{(\mu B + \frac{\omega}{2})}{\Omega} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad \cdot \quad D_2 = i \frac{(\mu B - \frac{\omega}{2})}{\Omega} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (64)$$

As amplitudes $a_1(t)$ e $a_2(t)$ são conseguidas introduzindo os

coeficientes A_1 (63), D_1 (64) e A_2 (63) D_2 (64) em (50) e (51), respectivamente. No instante t , a probabilidade: $P_1^{(+)}(t)$ que o sistema esteja no estado fundamental 1, ou, $P_2^{(+)}(t)$, no estado excitado 2, é a seguinte:

$$P_1^{(+)}(t) = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \frac{\omega \cdot \omega_1^2}{2\mu B \cdot \Delta\Omega^2} \sin^2(\Delta\Omega t)$$

$$P_2^{(+)}(t) = \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \frac{\omega \cdot \omega_1^2}{2\mu B \cdot \Delta\Omega^2} \sin^2(\Delta\Omega t) \quad (65)$$

Elas podem ser "medidas" por meio de instrumentos de espectroscopia.

III.2.6 Probabilidade do Sistema estar em um Autoestado do Spin

Passemos agora a considerar a probabilidade de que uma partícula de spin $1/2$ esteja em um autoestado do SPIN, em um instante t , para o sistema inicialmente preparado:

(i) no estado fundamental

(ii) no estado "up" do operador de spin.

No sentido de resolvermos as equações de movimento para as amplitudes $a_n(t)$, observaremos um campo magnético $B(t)$ que varia harmonicamente, como expresso em (19). A probabilidade de que a partícula esteja em um autoestado do operador de spin J_z , será obtida pelo produto

$$b_{\pm}(t) = \langle \alpha_{\pm} | \Psi(t) \rangle \quad (66)$$

α_{\pm} são autoestados de σ_z (7) e $|\Psi(t)\rangle$ é o estado do sistema que satisfaz a equação de Schrödinger (2). Nesta equação o hamiltoniano é expresso em (20). As amplitudes $b_{\pm}(t)$ satisfazem a equação de movimento (I.1.5)

$$i \frac{d}{dt} b_{\pm}(t) = -\mu B \left(\cos\theta b_{\pm}(t) + e^{-i\omega t} \sin\theta b_{\mp}(t) \right) \quad (67)$$

e

$$i \frac{d}{dt} b_{-}(t) = -\mu B (-\cos\theta b_{-}(t) + e^{i\omega t} \sin\theta b_{+}(t)) \quad (68)$$

Co ângulo polar θ é constante no tempo e o ângulo azimutal $\varphi(t)$ varia linearmente: $\varphi = \omega t$). Introduzindo o "fator integrante" nas equações de movimento, deduzimos a forma das amplitudes

$$b_{+}(t) = e^{-i\frac{\omega}{2}t} \{ F_{+} \cos(\Delta\Omega t) + G_{+} \sin(\Delta\Omega t) \} \quad (69)$$

$$b_{-}(t) = e^{-i\frac{\omega}{2}t} \{ F_{-} \cos(\Delta\Omega t) + G_{-} \sin(\Delta\Omega t) \} \quad (70)$$

Quando substituimos (69) em (67) e (70) em (68), obtemos equações que relacionam os coeficientes F_{+} , F_{-} , G_{+} , G_{-}

$$\left(\frac{1}{2}\omega + \omega_0\right) F_{+} + i\Delta\Omega G_{+} + \omega_1 F_{-} = 0 \quad (71)$$

$$-\left(\frac{1}{2}\omega + \omega_0\right) F_{-} + i\Delta\Omega G_{-} + \omega_1 F_{+} = 0 \quad (72)$$

Estes são determinados especificando-se as condições iniciais em que o sistema foi preparado.

(1) Sistema Preparado no Estado Fundamental

Uma amostra, com partículas de spin $1/2$ pode ser preparada no estado fundamental controlando a sua temperatura T , para esta ser menor que a diferença $(2\mu B)$ entre os níveis de energia do sistema. Quando este atingiu o equilíbrio, seu estado inicial $|\psi(0)\rangle$ é expresso em função dos autovetores do operador σ_3

$$|\psi(0)\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \alpha_{+} + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \alpha_{-} = |\psi_1(0)\rangle \quad (73)$$

A equação anterior corresponde ao autoestado $|\psi_1(t)\rangle$ (21)

em $t = 0$. Os coeficientes $b_{+}(t)$ (69) e $b_{-}(t)$ (70) em $t = 0$ são obtidos da expressão do estado inicial (73), recordando que:

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= b_{+}(0) \alpha_{+} + b_{-}(0) \alpha_{-} \\ b_{+}(0) &= F_{+} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad , \quad b_{-}(0) = F_{-} = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned} \quad (74)$$

Quando introduzimos as expressões (74) em (71) e (72), concluímos que

$$G_+ = i\Omega^{-1} \left[\omega_1 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) + \left(\omega_0 + \frac{\omega}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] \quad (75)$$

e

$$G_- = i\Omega^{-1} \left[\omega_1 \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - \left(\omega_0 + \frac{\omega}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \right] \quad (76)$$

No instante t , a probabilidade $P_+^{(1)}(t)$ do spin ser up (+) é calculada introduzindo G_+ (75) e F_+ (74) na amplitude $b_+(t)$ (69):

$$P_+^{(1)}(t) = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \frac{\omega \cdot \omega_1^2}{2\mu_B \Omega^2} \sin^2(\Omega t) \quad (77)$$

Neste mesmo instante, a probabilidade $P_-^{(1)}(t)$ do spin ser down (-) é obtida introduzindo G_- (76) e F_- (74) na amplitude $b_-(t)$ (70)

$$P_-^{(1)}(t) = \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) - \frac{\omega \cdot \omega_1^2}{2\mu_B \Omega^2} \sin^2(\Omega t) \quad (78)$$

Essas probabilidades serão verificadas pela medida da magnetização da amostra.

(ii) Sistema Preparado com Spin Up \uparrow

Aplicando um campo magnético intenso na direção z , podemos preparar o sistema no autoestado de spin up, visto que essa configuração é favorecida em termos da energia. Logo, no instante $t = 0$, as amplitudes de probabilidade são

$$b_+(0) = 1 \quad b_-(0) = 0 \quad (79)$$

Decorre das expressões (69) e (70) que, neste instante, as amplitudes estejam relacionadas aos coeficientes F_+ e F_- da seguinte maneira:

$$b_+(0) = F_+ = 1 \quad b_-(0) = F_- = 0 \quad (80)$$

Introduzindo-os em (71) e (72), resultam as expressões para os coeficientes

$$G_+ = i\Omega^{-1} \left(\omega_0 + \frac{\omega}{2}\right) \quad G_- = i\Omega^{-1} \cdot \omega_1 \quad (81)$$

Estabelecida a forma dos coeficientes F_+ , G_+ , F_- e G_- , estamos em condições de expressar as amplitudes $G_+(t)$ (69) e $b_-(t)$ (70). Consequentemente, no instante t , a probabilidade $P_-^{(+)}(t)$ de encontrar o sistema com spin down, é

$$P_-^{(+)}(t) = \omega_1^2 \Omega^{-2} \sin^2(\Omega t) \quad (82)$$

e a probabilidade $P_+^{(+)}(t)$ de encontrar o sistema com spin up

$$P_+^{(+)}(t) = 1 - \omega_1^2 \Omega^{-2} \sin^2(\Omega t) \quad (83)$$

A frequência de precessão do spin ao redor de um campo magnético $\mathbb{B} = (0, 0, B_3)$ é dada por: $\omega_{21} = \frac{1}{\hbar} (\epsilon_2 - \epsilon_1) = \frac{1}{\hbar} (2\mu B)$. Os valores esperados das componentes do operador de spin $\langle S_x \rangle$ e $\langle S_y \rangle$ variam no tempo de acordo com a frequência ω_{21} . A condição de ressonância para esse sistema é satisfeita, quando a frequência ω do campo magnético "girante" coincide com ω_{21} de precessão do spin. Nesta condição ($\omega \sim 2\mu B$), as probabilidades $P_-^{(+)}(t)$ (82) e $P_+^{(+)}(t)$ (83) indicam que, além da precessão do spin, o sistema apresenta uma sucessão de "spin-flops" $| + \rangle \rightleftharpoons | - \rangle$.

Para o sistema: partícula de spin $1/2$ na presença de um campo magnético que roda com velocidade angular constante em torno de um eixo coordenado, a hamiltoniana é o operador energia. O operador de spin e a energia não comutam entre si, mas correspondem á observáveis do sistema. Quando consideramos um referencial, em que o campo magnético é constante, a hamiltoniana não mais corresponde á energia do sistema. Estes operadores se modificam diferentemente sob transformações unitárias. No entanto, quando distinguimos a hamiltoniana do operador energia, no referencial "girante" as probabilidades, fases de Berry e os níveis de energia obtidos são

iguais àqueles calculados no referencial de laboratório (neste, observa-se o campo magnético "girante"). Quando assumimos que a hamiltoniana é o operador energia do sistema, no referencial "girante", perdemos a condição de invariância das probabilidades, fases de Berry, fases totais e dos níveis de energia. No limite adiabático a fase total invariante e a não-invariante por transformações unitárias coincidem.

CONCLUSÃO

Estudamos nesta dissertação uma formulação invariante por transformações unitárias para a fase de Berry (proposta por D.H. Kobe).

Originalmente, a fase de Berry foi formulada para sistemas cujos hamiltonianos dependem de parâmetros que variam cíclica e adiabaticamente. Esta fase era invariante por transformações dependentes nas coordenadas do espaço de parâmetros. Posteriormente, generalizou-se o conceito de fator de fase geométrico não integrável para sistemas cujos hamiltonianos têm espectro degenerado. Uma série de experimentos confirmaram a dependência da fase de Berry de sistemas (em que a direção do spin "roda") ao ângulo sólido definido no espaço de parâmetros. Uma generalização foi expressa associando o fator de fase geométrico a ciclos no espaço projetivo de Hilbert. Nesta formulação, abandonou-se a restrição de evolução adiabática do hamiltoniano do sistema.

Recentemente cogitou-se na possibilidade de se remover a fase de Berry. Esta é uma grandeza observável e, portanto, não deve ser passível de remoção por transformações unitárias. D.H. Kobe reformulou a definição da fase de Berry introduzindo um termo que mede a diferença entre o hamiltoniano e o operador energia do sistema. Sob uma transformação unitária o hamiltoniano e a energia se modificam de maneiras distintas. Com a introdução deste termo na definição original da fase de Berry, obtemos a fase

invariante por transformações unitárias. Ela independe das hipóteses de evolução cíclica e adiabática do sistema. Estudamos o oscilador harmônico generalizado, dependente do tempo. (OHG) (III.1) à luz dos trabalhos de Kobe. As fases de Berry para os autoestados do sistema é nula. Nossos resultados não estão de acordo com os trabalhos de Gerbert e Rohrlich. Estes autores afirmam que a fase de Berry para os autoestados do OHG pode ser removida por uma transformação unitária.

Nenhuma das formulações, mas somente o estudo da fase de Berry para o caso de uma partícula de spin $1/2$ em um campo magnético arbitrário (III.2) teve nossa participação direta. No entanto, ficamos motivados a compreender o significado das transformações de Gauge e da fase de Berry na Mecânica Quântica não-relativística. Nossa análise, em concordância com as formulações de Yang e Kobe, sugere que a fase de Berry, sendo uma observável física, não pode ser removida por transformações unitárias. Talvez compreendamos agora as palavras de R. Jackiw: "(...) We appreciate Berry's contribution, not necessarily for the new physics that it exposes, but rather for its universality with which it spans phenomena as diverse as atomic physics and modern particle physics."

Esperamos que o emprego dos conceitos da análise global possibilite uma formulação covariante para a fase geométrica.

APÊNDICE 1 - O OPERADOR POTÊNCIA, INVARIÂNCIA DE GAUGE^[45,46,47]

Consideremos uma partícula (sem spin) de massa m e carga q , em presença de um campo eletromagnético clássico e de um campo conservativo dependente de r . A cada instante t , os campos elétrico $E(r,t)$ e magnético $B(r,t)$, em todo espaço, podem ser descritos pelo potencial $A_\mu(r,t) = (A(r,t); A_0(r,t))$. O hamiltoniano para esse sistema contém $V(r)$: a energia potencial, a saber,

$$\hat{H}(A, A_0) = \frac{1}{2m} [p - qA]^2 + qA_0 + V(r) \quad (1)$$

Esta energia é definida de forma que menos seu gradiente corresponda a uma força conservativa $f(r) = -\nabla_r V(r)$ e $\nabla_r \wedge f(r) = 0$.

As transformações de Gauge, em um contexto clássico, são as transformações canônicas cujas funções geratrizes são da forma $F = -r' \cdot p' + r p' - q\Lambda(r,t)$. Na formulação quântica, essas transformações são as unitárias, que dependem das variáveis r e t . As funções geratrizes $\Lambda(r,t)$ também dependem destas variáveis. A cada instante, a coordenada r e o momento p assumem a forma r' e p' , a saber,

$$r'(t) = r(t) \quad p'(t) = p(t) - q \nabla_r \Lambda(r,t) \quad (2)$$

A evolução do estado $|\psi(t)\rangle$ é descrita pela equação de Schrödinger

$$H(A, A_0) |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \quad (3)$$

Sob uma transformação de gauge, o estado $|\psi(t)\rangle$ que caracteriza o sistema assume a forma

$$|\psi'(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda} |\psi(t)\rangle \quad (4)$$

O emprego da equação (3) possibilita-nos escrever a derivada $\frac{\partial}{\partial t}$ de $|\psi'(t)\rangle$ sob a forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi'(t)\rangle = \left\{ -q \frac{\partial \Lambda}{\partial t} + e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda} \hat{H} e^{-\frac{i}{\hbar} q \Lambda} \right\} |\Psi'(t)\rangle \quad (5)$$

Se admitirmos que a equação de Schrödinger para o estado transformado $|\Psi'(t)\rangle$ é formalmente a mesma que definimos em (3)

$$H(A', A_0) |\Psi'(t)\rangle = i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} |\Psi'(t)\rangle \right) \quad (6)$$

basta-nos comparar (6) com (5), para definirmos o hamiltoniano transformado em função de $H(A, A_0)$ (1), a saber,

$$\begin{aligned} \hat{H}(A', A_0) &\doteq e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda} \hat{H}(A, A_0) e^{-\frac{i}{\hbar} q \Lambda} - q \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial t} \right) = \\ &= (2m)^{-1} [p' - qA(r)]^2 + V(r') + qA_0 - q \frac{\partial \Lambda}{\partial t} = \\ &= \frac{1}{2m} [p - q(A + \nabla_r \Lambda)]^2 + V(r') + q(A_0 - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}) = \\ &= \left\{ (2m)^{-1} (p - qA')^2 + V(r') + qA_0 \right\} - q \frac{\partial \Lambda}{\partial t} = \\ \hat{H}(A', A_0) &= \frac{1}{2m} (p - qA')^2 + V(r') + qA_0 \end{aligned} \quad (6a)$$

Denotaremos por $H'(A', A_0)$ o termo $e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda} \hat{H}(A, A_0) e^{-\frac{i}{\hbar} q \Lambda}$, a saber,

$$H'(A, A_0) = e^{\frac{i}{\hbar} q \Lambda} \hat{H}(A, A_0) e^{-\frac{i}{\hbar} q \Lambda} = \left\{ (2m)^{-1} [p - q(A + \nabla_r \Lambda)]^2 + V(r') + qA_0 \right\} \quad (6b)$$

Sob essa transformação de gauge, o momentum cinético $\pi = p - qA$ assume a forma

$$\begin{aligned} [\pi(p, A)]' &= p' - qA(r', t) = p - q \nabla_r \Lambda(r, t) - qA(r, t) \\ &= \pi(p, A) - q \nabla_r \Lambda \end{aligned} \quad (7)$$

e a energia, componente zero do quadrivector momentum-energia

$$\pi_0 = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0, \text{ transforma-se em} \quad (8)$$

$$[\pi_0(A_0)]' = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0(r', t) + q \frac{\partial \Lambda}{\partial t} = \pi(A_0) + q \frac{\partial \Lambda}{\partial t}$$

Vamos admitir que o operador $K(A', A_0)$ é formalmente igual a $K(A, A_0)$. Os potenciais (A, A_0) estão relacionados aos correspondentes transformados da seguinte maneira:

$$e \quad A_0' = A_0 - \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \quad (9)$$

$$A' = A + \nabla \Lambda$$

Denotaremos $\exp(\frac{i}{\hbar} q \Lambda) K(A, A_0) \exp(-\frac{i}{\hbar} q \Lambda)$ por $K'(A', A_0')$. Usando estes símbolos, verificamos as seguintes relações para algumas grandezas físicas, a saber,

$$\pi' = \pi \quad ; \quad [\pi(p, A)]' = \pi(p', A') \quad ; \quad [\pi_0(A_0)]' = \pi_0(A_0')$$

$$[\pi(p, A)]' = p - q \nabla \Lambda - q A = p - q A' = \pi(p, A')$$

$$[\pi_0(\frac{\partial}{\partial t}, A_0)]' = i \frac{\partial}{\partial t} + q \frac{\partial \Lambda}{\partial t} - q A_0 = i \frac{\partial}{\partial t} - q A_0' = \pi_0(\frac{\partial}{\partial t}, A_0') \quad (10)$$

$$e \quad p' = p - q \nabla \Lambda \neq p$$

$$H'(A, A_0) = \frac{1}{2m} [p - A']^2 + q A_0' + q \frac{\partial \Lambda}{\partial t} + V(\pi) = H(A', A_0') \\ = H(A', A_0') + q \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \neq H(A, A_0) \quad (10a)$$

As igualdades e desigualdades em (10) e (10a) podem ser interpretadas sob a luz do conceito de observável física. K.H. Yang [5] propôs que um operador somente representa uma grandeza física com um análogo clássico, se a equação de movimento do valor esperado desse operador é formalmente a mesma para grandeza clássica correspondente. Assim, o princípio de correspondência permite-nos discernir os operadores que representam observáveis físicas. Classicamente, uma grandeza física observável associada a um sistema, a cada instante, assume valores independentes do gauge utilizado para descrever o campo eletromagnético^[47]. Para um operador $K(A, A_0)$, que corresponde a uma grandeza observável, o valor esperado deve ser um invariante por transformações de gauge

$$\langle \Psi(t) | K(A, A_0) | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi'(t) | K(A', A_0') | \Psi'(t) \rangle \quad (11)$$

ou expresso na forma

$$\langle \Psi(t) | K(A, A_0) | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi'(t) | K'(A, A_0) | \Psi'(t) \rangle \quad (12)$$

Comparando as expressões (11) com (12) obtemos a relação

$$K'(A, A_0) = K(A', A'_0) \quad (13)$$

Portanto, um operador depende de potenciais eletromagnéticos e invariante de gauge, se transformado é igual ao operador original com os potenciais transformados⁽⁴⁷⁾. Se compararmos (6b), (6a), (10a) e (13), percebemos que o hamiltoniano não é invariante de Gauge.

Se os campos dependem do tempo, $qA_0(r, t)$ não corresponde a uma energia potencial

$$\begin{aligned} qIE &= -\nabla qA_0 - \frac{\partial}{\partial t} qA \\ -\nabla(qA_0) &= qIE + q \frac{\partial A}{\partial t} \end{aligned} \quad (13a)$$

Por meio da lei de Faraday, percebemos que a força elétrica $qIE(r, t)$ não é conservativa. O termo $q \frac{\partial A}{\partial t}$ devido à dependência de gauge do potencial não corresponde a uma grandeza física.

O operador energia do sistema $\hat{E}(A)$ é obtido subtraindo da hamiltoniana o termo qA_0

$$\hat{E}(A) \doteq \hat{H}(A, A_0) - qA_0 = \hat{H}(A, 0) \quad (14)$$

Podemos reescrever o operador \hat{E} em função do momentum cinético

$\pi = p - qA$ e da energia potencial $V(r)$

$$\hat{H}(A, 0) = \hat{E}(A) = \frac{1}{2m} \pi^2 + V(r) \quad (15)$$

Por definição, \hat{E} é o operador hermitiano definido por $\pi_0 = i\frac{\partial}{\partial t} - qA_0$.

Este corresponde classicamente à componente zero do quadrivetor momentum-energia π_μ . Sendo π_0 e π invariantes de gauge (10) (assim como $V(r)$), concluímos que

$$\hat{H}'(A, 0) = \hat{H}(A', 0) \quad (16)$$

é um invariante.

Finalmente, reescreveremos a equação de Schrödinger (4) em função de operadores invariantes de gauge

$$H(A, 0) |\Psi(t)\rangle = \pi_0 |\Psi(t)\rangle \quad (17)$$

No problema de autovalores para o operador energia $H(A, 0) = \hat{E}(A)$

$$\hat{E}(A) |\Psi_n(t)\rangle = \epsilon_n |\Psi_n(t)\rangle \quad (18)$$

eles (ϵ_n) são invariantes por transformações de gauge e o estado $|\Psi(t)\rangle$ do sistema pode ser expresso na base completa das autofunções $|\Psi_n(t)\rangle$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n |\Psi_n(t)\rangle \quad . \quad a_n \doteq \langle \Psi_n | \Psi \rangle \quad (19)$$

Os coeficientes a_n também são invariantes por transformações de gauge (I.4.18) e satisfazem o conjunto de equações de movimento

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_n - (\epsilon_n - \langle \Psi_n | \pi_0 | \Psi_n \rangle) a_n = - \sum_{l \neq n} \langle \Psi_n | \pi_0 | \Psi_l \rangle a_l \quad (20)$$

Nós as obtemos, introduzindo a expressão (19) na equação de Schrödinger para o estado $|\Psi(t)\rangle$ do sistema. Vamos a seguir interpretar o produto $\langle \Psi_n(t) | \pi_0 | \Psi_l(t) \rangle$ em termos do operador potência \hat{P} . Num sistema isolado (ou conservativo), a energia deve ser uma constante, independente do tempo. Se o sistema não é isolado, ele está num campo externo, dependente do tempo, que troca energia com o sistema. A variação da energia em relação ao tempo é a potência, trocada entre o sistema e o campo externo.

Consideremos o operador Potência \hat{P} relacionado à troca de energia entre o campo eletromagnético clássico (dependente do tempo) e a partícula quântica carregada. A densidade de energia $u_{e.m.}$ do campo eletromagnético é expressa em função dos campos elétrico $E(r,t)$ e magnético $B(r,t)$, dependentes do tempo

$$u_{e.m.} = (E^2 + B^2) \quad . \quad (21)$$

O fluxo de energia do campo é conhecido como vetor de Poynting

$$\underline{S}_{em} = (\underline{E} \wedge \underline{B}) \quad (22)$$

O campo eletromagnético dependente do tempo, solução das equações de Maxwell, satisfaz o teorema de Poynting. Segundo este, o campo troca energia com a partícula carregada na razão de $-\underline{J}(\underline{r}, t) \cdot \underline{E}(\underline{r}, t)$ por uma unidade de volume. Essa propriedade pode ser expressa por

$$\frac{\partial u_{em}}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{S}_{em} = -\underline{J} \cdot \underline{E} \quad (23)$$

$\underline{J}(\underline{r}, t)$ é a densidade de corrente no interior do volume. No caso de uma partícula carregada, a densidade $\underline{J}(\underline{r}, t)$ será indicada

$$\underline{J} = \text{Re} \{ \psi^* q \hat{v} \psi \} \quad (24)$$

em que, \hat{v} é o operador velocidade $\hat{v} \doteq \frac{1}{m} \pi$ e π é o momentum cinético ($\pi = p - qA$). Das equações de movimento para a partícula carregada, obtemos a densidade de energia trocada entre o campo e a partícula

$$\underline{J} \cdot \underline{E} = \mathcal{P} = \text{Re} \{ \psi^* \hat{P} \psi \} \quad (25)$$

O operador potência \hat{P} é assim expresso:

$$\hat{P} = \frac{1}{2} \{ \hat{v} \cdot qE + qE \cdot \hat{v} \} \quad (26)$$

A densidade de potência trocada é definida classicamente pela projeção da força na direção da velocidade da partícula. Observe-mos que o campo \underline{B} não realiza trabalho sobre a partícula. Logo, formulamos o teorema de Poynting introduzindo a densidade de potência \mathcal{P} (25) (26) em (23):

$$\frac{\partial u_{em}}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{S}_{em} = -\mathcal{P} \quad (27)$$

A densidade de energia da partícula é função do operador $\hat{E}(A)$

$$u_p = \text{Re} \{ \psi^* \hat{E}(A) \psi \} \quad (28)$$

assim como o fluxo de energia

$$\underline{S}_p = \text{Re} \{ (\hat{v} \psi)^* \hat{E}(A) \psi + \psi^* \hat{v} \hat{E}(A) \psi \} \quad (29)$$

Da equação de Schrödinger, deduzimos uma equação para a densidade de energia da partícula, análoga à obtida para a densidade de energia do campo eletromagnético (27), a saber,

$$\frac{\partial}{\partial t} u_p + \nabla \cdot S_p = \mathcal{D} \quad (30)$$

\mathcal{D} representa a densidade de potência absorvida do campo eletromagnético pela partícula. Somando as equações (27) e (30), obtemos a condição de conservação da densidade de energia total. Para uma partícula quântica carregada num campo eletromagnético dependente do tempo, a densidade de potência trocada pelo campo é igual à absorvida pela partícula. Podemos interpretar fisicamente este resultado como a conservação local de energia do sistema.

Vamos a seguir mostrar que a equação de movimento (20) para as amplitudes de probabilidade $a_n(t)$ será expressa em termos do operador potência \hat{P} (26) sob a forma

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_n - \langle \psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0 | \psi_n \rangle \right\} a_n(t) = - \sum_{l \neq n} (\epsilon_n - \epsilon_l)^{-1} \cdot i\hbar \langle \psi_n | \hat{P} | \psi_l \rangle a_l \quad (31)$$

Diferenciando, com relação ao tempo t , a equação de autovalores para o operador $\hat{E}(A) = H(A, 0)$ (18) e efetuando o produto da equação resultante com $\langle \psi_n(t) |$, obtemos

$$\langle \psi_l | \frac{d}{dt} \hat{E}(A) \psi_n \rangle + \epsilon_l \langle \psi_l | \frac{d}{dt} \psi_n \rangle = \left(\frac{d}{dt} \epsilon_n \right) \langle \psi_l | \psi_n \rangle + \epsilon_n \langle \psi_l | \frac{d}{dt} \psi_n \rangle$$

$$\text{ou } \langle \psi_l | \frac{d}{dt} \hat{E}(A) \psi_n \rangle = \left(\frac{d}{dt} \epsilon_n \right) \delta_{ln} + (\epsilon_n - \epsilon_l) \langle \psi_l | \frac{d}{dt} \psi_n \rangle \quad (32)$$

A derivada temporal do operador $\hat{E}(A)$ (15) é assim expressa

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \hat{E}(A) &= \frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial t} \left\{ (p - qA)(p - qA) \right\} = \frac{q}{2m} \left\{ - \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right) (p - qA) - (p - qA) \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right) \right\} \\ &= \frac{q}{2} \left\{ (E + \nabla A_0) \cdot \hat{v} + \hat{v} \cdot (E + \nabla A_0) \right\} \end{aligned} \quad (33)$$

onde o operador velocidade é definido $\hat{v} \doteq \frac{1}{m} \pi$ $\frac{\partial V(r)}{\partial t} = 0$. O
 comutador de $\hat{E}(A)$ com o potencial qA_0 resulta

$$\begin{aligned} [\hat{E}(A); qA_0] &= -\frac{\hbar^2}{2m} [(\nabla - qA) \cdot (\nabla - qA); qA_0] \\ &= -\frac{1}{2} i\hbar q (\hat{v} \cdot \nabla A_0 + \nabla A_0 \cdot \hat{v}) \end{aligned} \quad (34)$$

onde o operador momentum é representado por $\hat{p} = -i\hbar \nabla_r$

e o comutador $[V(r), qA_0] = 0$. Comparando (34) com a derivada temporal do operador $\hat{E}(A)$ (33), reescrevemos essa derivada como:

$$\frac{\partial \hat{E}(A)}{\partial t} = \frac{1}{2} \{ \hat{v} \cdot qE + qE \cdot \hat{v} \} + \frac{i}{\hbar} [\hat{E}(A), qA_0] \quad (35)$$

O termo entre $\{ \quad \}$ é o operador potência \hat{P} , definido em (26). Introduzindo a expressão (35) em (32) e supondo $\epsilon_n \neq \epsilon_m$, obtemos:

$$\langle \Psi_n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qA_0 | \Psi_\ell \rangle = -i\hbar (\epsilon_n - \epsilon_\ell)^{-1} \langle \Psi_n | \hat{P} | \Psi_\ell \rangle \quad (36)$$

A equação de movimento para a amplitude (I.4.21) pode ser reescrita usando o elemento (36), o que nos permite introduzir o operador \hat{P} invariante por transformações de gauge (31).

Consideremos, agora, uma partícula com massa m , carga q e spin s , movendo-se num campo eletrostático $E_0(r)$ conservativo e num campo eletromagnético dependente do tempo $E(r,t)$ e $B(r,t)$ ^[46].

A equação de Schrödinger para a evolução do sistema é dada por:

$$\hat{H}(A, A_0) |\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle \quad (37)$$

O hamiltoniano, associado ao sistema, é expresso na forma

$$H(A, A_0) = (2m)^{-1} (p - qA)^2 + qV_0(r) + qA_0 - \mu_0 S \cdot B(r,t) \quad (38)$$

em que A e A_0 são potenciais dependentes do tempo, que descrevem os campos $E(r,t)$ e $B(r,t)$, obtidos da diferenciação dos potenciais. O termo $qV_0(r)$ representa a energia potencial eletrostática.

Definimos a densidade $\rho(r,t)$ como

$$\rho(r,t) \doteq q \Psi^*(r,t) \Psi(r,t) \quad (39)$$

e a densidade de corrente

$$\mathbf{J}(r,t) \doteq \frac{1}{2} \left\{ [\Psi^*(q\hat{v}\Psi)] + [\Psi^*(q\hat{v}\Psi)]^\dagger \right\} + c\mu_0 \nabla \wedge (\Psi^* \mathbf{S} \Psi) \quad (40)$$

\hat{v} representa o operador velocidade da partícula, a saber,

$$\hat{v}(x) = m^{-1} \cdot (p - \frac{q}{c} A) \quad (41)$$

a equação da continuidade é satisfeita pelas densidades $\rho(r,t)$ (39)

e (40): $\mathbf{J}(r,t)$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(r,t) + \nabla \cdot \mathbf{J}(r,t) = 0 \quad (42)$$

O teorema de Poynting, que descreve as trocas de energia na interação da matéria com o campo eletromagnético, pode ser expresso para esse sistema

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \hat{H}_E | \Psi(t) \rangle = \int d^3r \mathbf{J}(r,t) \cdot \mathbf{E}(r,t) \quad (43)$$

Definimos o operador \hat{H}_E (43), por

$$\hat{H}_E \doteq \hat{H}_E^{\text{ORB.}} + \hat{H}_E^{\text{SPIN}} \doteq \frac{1}{2m} (p - q/c A)^2 + qV_0 - \mu_0 \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \quad (44)$$

onde os operadores $\hat{H}_E^{\text{ORB.}}$ e \hat{H}_E^{SPIN} são indicados assim:

$$\hat{H}_E^{\text{ORB.}} \doteq \frac{1}{2m} (p - q/c A)^2 + qV_0 \quad \hat{H}_E^{\text{SPIN}} \doteq -\mu_0 \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \quad (45)$$

Observemos, também, que o hamiltoniano \hat{H} (38) para o sistema difere do operador \hat{H}_E (44) pelo potencial qA_0 .

A equação de movimento de $\hat{H}_E^{\text{ORB.}}$ apresenta a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{H}_E^{\text{ORB.}} | \Psi \rangle &= \langle \Psi | \frac{\partial}{\partial t} \hat{H}_E^{\text{ORB.}} - \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_E^{\text{ORB.}}, \hat{H}] | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \frac{q}{2m} \left\{ (p - \frac{q}{c} A) \cdot (-\nabla A_0 - \frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}) + \right. \\ &\quad \left. (-\nabla A_0 - \frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}) \cdot (p - \frac{q}{c} A) \right\} | \Psi \rangle = \\ &= \langle \Psi | \frac{1}{2} \left\{ \hat{v} \cdot q\mathbf{E} + q\mathbf{E} \cdot \hat{v} \right\} | \Psi \rangle \doteq \langle \Psi | \hat{P} | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (46)$$

Nesta expressão, consideramos a definição do operador $\hat{U} = \frac{1}{m} (p - qA)$ e a relação de comutação entre qA_0 e H_E^{ORB} , dada por:

$$[qA_0, \hat{H}_E^{ORB}] = \frac{1}{2} i\hbar \{ \hat{U} \cdot \nabla (qA_0) + \nabla (qA_0) \cdot \hat{U} \} \quad (47)$$

Comparando a definição da densidade de corrente $J(r, t)$ com a equação de movimento do H_E^{ORB} , observamos que (46) pode ser expressa em função da densidade de corrente

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | H_E^{ORB} | \psi \rangle = \int dr \, IE \cdot \left\{ \frac{1}{2} \left[q\psi^* \frac{(p - qA)}{m} \psi \right] \left[q\psi^* \frac{(p - qA)}{m} \psi \right]^\dagger \right\} \quad (48)$$

A evolução temporal de H_E^{SPIN} observa a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \psi | H_E^{SPIN} | \psi \rangle &= \langle \psi | \frac{\partial H_E^{SPIN}}{\partial t} | \psi \rangle = -\mu_0 \int dr (\psi^* \mathbf{S} \psi) \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ &= \mu_0 \int dr (\psi^* \mathbf{S} \psi) \cdot \nabla \wedge IE \\ &= \mu_0 \int dr \left\{ \nabla \cdot [IE \wedge (\psi^* \mathbf{S} \psi)] + E \cdot [\nabla \wedge (\psi^* \mathbf{S} \psi)] \right\} \end{aligned} \quad (49)$$

Demonstramos, assim, como obter a equação (43) a partir das equações (46) e (49).

A seguir, vejamos o nosso sistema descrito por um hamiltoniano que contém um termo de interação spin-órbita

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (p - qA)^2 + qA_0 + V_0 - \mu_0 \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} + \xi(r) \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{S} \wedge (p - qA) \quad (50)$$

Note-se que a condição de invariância de gauge da equação de Schrödinger nos leva a substituir p por $(p - qA)$ no termo de interação spin-órbita. A função $\xi(r)$ é

$$\xi(r) = \frac{q\hbar^2}{2m^2} \frac{1}{r} \left(\frac{d}{dr} V_0(r) \right) \quad (51)$$

onde admitimos que $V_0(r)$ é um potencial central. O operador velocidade para o nosso sistema é expresso por

$$\hat{U}(t) = \frac{1}{m} (p - qA) + \xi(r) \boldsymbol{\kappa} \wedge \boldsymbol{\kappa} \quad (52)$$

e o operador densidade de corrente (40) mantém sua forma

$$J(r,t) = \frac{1}{2} \left\{ [\Psi^*(q\hat{v})\Psi] + [\Psi^*(q\hat{v})\Psi]^\dagger \right\} + \mu_0 \nabla \wedge (\Psi^* S \Psi) \quad (53)$$

A equação da continuidade (42) e a equação de conservação da energia na interação campo-matéria são obtidas para o sistema, se considerarmos

$$H^E = \frac{1}{2m} (p - qA)^2 + qV_0(r) - \mu_0 S \cdot B + \xi(r) S \cdot r \wedge (p - qA) \quad (54)$$

e as equações de movimento para este operador.

Apresentamos assim uma formulação invariante do teorema de Poynting para a interação entre uma partícula e o campo eletromagnético, dependente do tempo. A variação temporal do valor esperado do operador energia é o operador potência, invariante de Gauge.

Uma onda plana varia harmonicamente no tempo se as componentes (cartesianas) dos campos E e B apresentam a forma

$$a \cos(\xi + \delta) = \text{Re} \{ a e^{-i(\xi + \delta)} \} \quad a > 0 \quad (1)$$

onde ξ denota a variável

$$\xi = \omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = \omega \left(t - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{S}}{c} \right) \quad (2)$$

O versor S representa a direção de propagação da onda. Se assumirmos que o eixo OZ está na direção S, a condição de transversalidade para os campos ($\mathbf{E} \cdot \mathbf{S} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} = 0$) será satisfeita se as componentes x e y dos campos forem diferentes de zero.

Consideremos, por exemplo, o campo E

$$\begin{aligned} E_x &= a_1 \cos(\xi + \delta_1) \\ E_y &= a_2 \cos(\xi + \delta_2) \end{aligned} \quad (3)$$

Se a diferença de fase $\delta = \delta_1 - \delta_2$ entre as componentes de E for um múltiplo inteiro de π ($n\pi$), a razão E_y/E_x será igual a $(-1)^n a_2/a_1$. Dizemos que a onda está linearmente polarizado. Os campos E e B são ortogonais entre si e encontram-se no plano perpendicular a direção S (a direção OZ). Se E é linearmente polarizado na direção x então H é linearmente polarizado na direção y.

Se a diferença de fase $\delta = \delta_1 - \delta_2$ entre as componentes de E for um múltiplo de $\pi/2$ da forma $\delta = n \pi/2$ (onde $n = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots$) e as amplitudes a_1 e a_2 (3) forem iguais, então a razão E_y/E_x será $\exp(-i\delta)$. Neste caso, a onda está circularmente polarizado. Convencionou-se denominar o campo E circularmente polarizado à direita para a diferença de fase $\delta = \frac{\pi}{2}$ e

circularmente polarizado à esquerda para a diferença de fase

$$\delta = -\pi/2.$$

O estado de polarização de uma onda monocromática plana pode ser representado pelos parâmetros de Stokes, a saber,

$$\begin{aligned} S_0 &= a_1^2 + a_2^2 \\ S_1 &= a_1^2 - a_2^2 & S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 &= S_0^2 \\ S_2 &= 2a_1 a_2 \cos \delta \\ S_3 &= 2a_1 a_2 \sin \delta \end{aligned} \quad (4)$$

O parâmetro S_0 é proporcional a intensidade da onda. Os parâmetros S_1 , S_2 e S_3 podem ser expressos em função de S_0 introduzindo os ângulos ψ ($0 \leq \psi < 2\pi$) e χ ($-\frac{\pi}{2} \leq \chi \leq \frac{\pi}{2}$), da seguinte maneira

$$\begin{aligned} S_1 &= S_0 \cos \chi \cos \psi \\ S_2 &= S_0 \cos \chi \sin \psi & S_0^2 &= S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 \\ S_3 &= S_0 \sin \chi \end{aligned} \quad (5)$$

As relações (5) indicam uma representação geométrica dos diferentes estados de polarização. Neste sentido, S_1 , S_2 e S_3 são as coordenadas cartesianas de um ponto P na esfera Σ de raio S_0 e o par (χ, ψ) são as coordenadas esféricas para este ponto. A todo estado de polarização de uma onda plana monocromática (de intensidade S_0 constante) corresponde um ponto em Σ e vice-versa.

Uma onda linearmente polarizada apresenta diferença de fase δ igual a $n\pi$ (n inteiro). Portanto, o parâmetro S_3 é nulo e o estado de polarização da onda é representado por pontos no plano do equador de Σ . Uma onda circularmente polarizada à direita

(resp. à esquerda) apresenta diferença de fase δ igual a $\pi/2$ (resp. $-\pi/2$). Logo os parâmetros $S_1 = S_2 = 0$ e o estado de polarização da onda é representado pelo pólo norte (resp. pólo sul) da esfera Σ . Outros pontos da esfera de polarização Σ (esfera de Poincaré) representam estados elipticamente polarizados.

Há duas maneiras de conceituar curvas. A primeira é como lugar geométrico de um conjunto de pontos. Nesse caso nos referimos à curva geométrica. Intuitivamente entendemos curva como um caminho percorrido por uma partícula que se desloca no espaço. Uma segunda maneira de se pensar em uma curva é como função de um parâmetro, por exemplo, t . Nem sempre basta sabermos onde a partícula esteve, também gostaríamos de saber quando ela esteve neste ponto. O parâmetro t é visto frequentemente como o tempo. Se desejarmos utilizar nossos conhecimentos de cálculo para descrever as propriedades geométricas da curva, é necessário vê-la como função. Observemos que sob este ponto de vista, a curva é a função e não o conjunto imagem (curva geométrica). Duas diferentes curvas podem ter o mesmo conjunto imagem (por exemplo, as curvas

$\alpha(t) = (t, 0, 0)$ e $\beta(t) = \left(\frac{1}{2}t^2, 0, 0\right)$ apresentam o mesmo conjunto imagem - uma reta em \mathbb{R}^3).

Def.1⁽⁴⁹⁾: Uma curva regular em \mathbb{R}^3 é uma função $\alpha: (a,b) \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$ de \mathcal{C}^k para um $k \geq 1$, tal que $\frac{d\alpha}{dt} \neq 0$ para todo $t \in (a,b)$.

Def.2: O vetor velocidade de uma curva regular $\alpha(t)$ em $t = t_0$ é a derivada $\frac{d\alpha}{dt}$ calculada em t_0 . O campo de vetores velocidade ao longo de α é a função de (a,b) à valores vetoriais $\frac{d\alpha}{dt}, \frac{d\alpha}{dt}: (a,b) \rightarrow \mathbb{R}^3$. O campo de vetores tangentes à curva regular $\alpha(t)$ é a função de (a,b) à valores vetoriais $T(t) = \frac{d\alpha}{dt} \cdot \left| \frac{d\alpha}{dt} \right|^{-1}, T: (a,b) \rightarrow \mathbb{R}^3$.

Def.3: Seja (c,d) um intervalo de \mathbb{R} .

Uma reparametrização de uma curva $\alpha: (a, b) \rightarrow \mathbb{R}^3$ é uma bijeção $g: (c, d) \rightarrow (a, b)$ em que g e sua inversa $g^{-1}: (a, b) \rightarrow (c, d)$ são funções \mathcal{C}^k , para um $k \geq 1$.

A imagem de uma curva e qualquer de suas reparametrizações são as mesmas. Grandezas que não se alteram, quando mudamos os parâmetros (reparametrizamos), são denominadas invariantes geométricos.

Observemos que o vetor tangente é uma invariante geométrica. Ele depende somente da imagem de $\alpha(t)$.

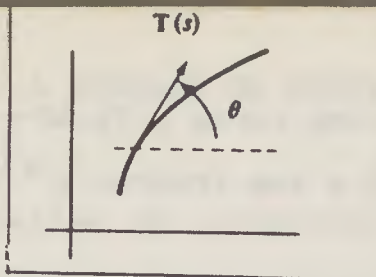
Def. 4: O comprimento de um segmento da curva regular $\alpha: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^3$ é definido $\int_a^b \left| \frac{d\alpha}{dt} \right| dt$.

É possível demonstrar que o comprimento de uma curva também não depende de uma particular parametrização.

Existe uma parametrização geométrica natural (pelo comprimento natural de arco) que empregamos para descrever todos os pontos de uma curva. Ela é parametrizada pelo comprimento de arco quando seu campo de vetores velocidade coincide com o campo tangente. Neste caso, o comprimento de arco $S = S(t)$ da curva $\alpha(t)$ é dado por $S(t) = \int_0^t \left| \frac{d\alpha}{dt} \right| dt$. De agora em diante as curvas serão parametrizadas pelo comprimento de arco. Quando uma curva α é assim parametrizada, $\left| \frac{d\alpha}{ds} \right| = 1$. Dizemos que a curva α apresenta velocidade unitária. Denotaremos a derivada $\frac{d\alpha}{ds}$ por α' .

Def. 5: A curvatura de $\alpha(s)$ é definida por $K(s) = \left| T'(s) \right|$.

A curvatura K de uma curva plana é a razão com que varia o ângulo formado pelo vetor tangente e uma linha horizontal, a saber,



Def.6: O campo de vetores normal principal para uma curva $\alpha(s)$ é o campo de vetores unitários, á saber, $N(s) = T'(s) \cdot (K(s))^{-1}$. O campo de vetores binormais para α é definido por $B(s) = T(s) \wedge N(s)$. A torção de $\alpha(s)$ é a função á valores reais definida como $\tau(s) = -B'(s) \cdot N(s)$. O plano determinado por $T(s)$ e $N(s)$ é denominado plano osculador. A torção $\tau(s)$ indica quão rapidamente (em uma vizinhança de s) a curva $\alpha(s)$ se afasta do plano osculador em s . Uma curva é denominada hélice se $\frac{K}{\tau}$ é uma constante.

Def.7: O conjunto Frenet-Serret para uma curva é assim expresso $\langle K(s), \tau(s), T(s), N(s), B(s) \rangle$.

Prop.1: Uma curva $\alpha(s)$ com $k(s) \neq 0$ e conjunto de Frenet, satisfaz as seguintes equações

$$T'(s) = K(s) N(s)$$

$$N'(s) = -K(s) T(s) + \tau(s) B(s)$$

$$B'(s) = -\tau(s) N(s)$$

$$\begin{pmatrix} T' \\ N' \\ B' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & K & 0 \\ -K & 0 & \tau \\ 0 & -\tau & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T \\ N \\ B \end{pmatrix}$$

Lema 1: Para todo S em que $K(s) \neq 0$, o conjunto $\langle T(s), N(s), B(s) \rangle$ definido sobre a curva $\alpha(s)$ é um conjunto ortonormal.

Devido a esse lema, para todo ponto de uma curva em que $K \neq 0$ está associado um conjunto de vetores ortonormal que se move ao longo da curva, a medida que a percorremos. Razão pela qual $\langle T(s), N(s), B(s) \rangle$ é classicamente conhecido como referencial móvel.

Teorema Fundamental das curvas⁽⁵¹⁾: Dadas as funções diferenciáveis $K(s) > 0$ e $\tau(s)$ (definidas em uma vizinhança do $0 \in \mathbb{R}$), existe um intervalo $I \subset \mathbb{R}$ ($0 \in \mathbb{R}$) e uma curva $\alpha(s)$ (parametrizada pelo comprimento de arco s), onde $K(s)$ é a curvatura e $\tau(s)$ a torção. Uma outra curva $\bar{\alpha}$, que satisfaz as mesmas condições, difere de α por um movimento rígido em \mathbb{R}^3 .

Embora, para uma dada curva exista uma parametrização geométrica natural (pelo comprimento de arco), para uma superfície não há tal parametrização. De fato, para muitos casos não é possível encontrar uma parametrização que descreva toda a superfície, especialmente de uma única maneira.

Def.8: Para $v \in \mathbb{R}^3$, o espaço tangente do \mathbb{R}^3 em v é o espaço vetorial de dimensão 3 cujos elementos são os pares $(v, w) \in \{v\} \times \mathbb{R}^3$. Denotaremos o espaço tangente em v por $T_v \mathbb{R}^3$.

Seja U um conjunto aberto em \mathbb{R}^n . Os elementos de U serão denotados por $u = (u^1, u^2, \dots, u^n)$.

Def.9⁽⁵¹⁾: O fibrado tangente de U (denotado por TU) é a união disjunta dos espaços tangentes $T_v \mathbb{R}^n, v \in U$, munida da projeção canônica $\pi: TU \rightarrow U$, que relaciona (v, w) a v . TU está em correspondência biunívoca com $U \times \mathbb{R}^n$.

Def.10⁽⁵⁰⁾: Um subconjunto $M \subset \mathbb{R}^3$ é uma superfície regular se, para cada $P \in M$, existe uma vizinhança V de P em \mathbb{R}^3 e uma transformação diferenciável f sobrejetora de um aberto $U \subset \mathbb{R}^2$ em $V \cap M \subset \mathbb{R}^3$ tal que: (1) f é um homeomorfismo (2) para todo $u \in U$, a diferencial $df_u: T_u(U) \rightarrow T_{f(u)}\mathbb{R}^3$ é injetora.

A transformação f é denominada uma parametrização e $V \cap M$ é

conhecida como vizinhança coordenada

A condição de regularidade para uma superfície está presente na definição acima, a saber, df_u injetora para todo $u \in U$. Podemos reescrever essa condição para uma superfície na forma:

$\frac{\partial f}{\partial u^1} \wedge \frac{\partial f}{\partial u^2} \neq 0$. Ela implica que o conjunto $\left\{ \frac{\partial f}{\partial u^1}; \frac{\partial f}{\partial u^2} \right\}$ é linearmente independente em cada ponto da superfície.

Def.11: O subespaço vetorial bidimensional $df_u(T_u \mathbb{R}^2) \subset T_{f(u)} \mathbb{R}^3$ é denominado espaço tangente de f em u e o denotaremos por $T_u f$. Os elementos de $T_u f$ são os vetores tangentes.

Denotaremos por

$$f_1 = \frac{\partial f}{\partial u^1} \quad \text{e} \quad f_2 = \frac{\partial f}{\partial u^2}$$

Def.12⁽⁴⁹⁾: Uma transformação de coordenadas ζ^k é uma função ζ^k , bijetora $\phi: V \rightarrow U$ entre abertos do \mathbb{R}^2 , cuja inversa $\phi^{-1}: U \rightarrow V$ é também ζ^k .

A normal unitária para a superfície em um ponto $P = f(a,b)$ é definida por $\eta(p) = f_1 \wedge f_2 \cdot |f_1 \wedge f_2|^{-1}$. Observemos que o vetor normal existe, pois $f_1 \wedge f_2 \neq 0$. Ele é perpendicular ao plano tangente em P .

O conjunto $\langle f_1, f_2, \eta \rangle$ é linearmente independente e constitui uma base para o \mathbb{R}^3 . Ele é denominado triedro de Gauss. Esta base serve aos mesmos propósitos na superfície que o referencial móvel em uma curva. No entanto, o conjunto $\langle f_1, f_2, \eta \rangle$ não é uma base ortonormal (em geral).

Def.13: Seja $f: U \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$ uma superfície. Uma curva em f é uma função γ , ζ^k ($k \geq 1$) definida por $\gamma: (a,b) \rightarrow \mathbb{R}^3$ tal que $\gamma = f \circ \beta$, onde $\beta: (a,b) \rightarrow U$ é uma curva em $U \subset \mathbb{R}^2$.

Prop.2: Seja $\gamma = f \circ \beta: (a,b) \rightarrow \mathbb{R}^3$ uma curva em f . Então

$$X(t) = \dot{\gamma}(t) = \sum_i \dot{u}^i f_i \circ \beta(t)$$

é o vetor tangente para f em $\beta(t)$.

Seja γ uma curva cuja imagem está definida em uma superfície $f: U \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$. γ apresenta um conjunto de Frenet bem definido em cada ponto da superfície $\{k, \tau, T, N, B\}$. N representa o campo de vetores normais a γ , $N \in T_{f(u)}\mathbb{R}^3$ enquanto que n corresponde ao vetor normal para f . Definimos a normal intrínseca de γ , a saber, $n = N \wedge T$. Denotaremos o conjunto de todos os vetores perpendiculares a f em P por N_P . O plano tangente e a normal (a menos de possíveis mudanças de sinal) para uma superfície (em um ponto) é invariante geométrico.

O espaço \mathbb{R}^3 pode ser decomposto em uma soma de vetores tangentes e normais a f em P . Em particular, o campo de vetores $\frac{d^2\gamma}{ds^2}$ ao longo de f pode ser representado na forma $\frac{d^2\gamma}{ds^2} = k_n(s) \cdot N(s) + k_g(s) \cdot S(s)$.

Def.14: Definimos a curvatura normal k_n a componente normal N de $\frac{d^2\gamma}{ds^2}$. A curvatura geodésica k_g é a componente de $\frac{d^2\gamma}{ds^2}$ na direção da normal intrínseca S .

k_n permite-nos medir a curvatura de f em \mathbb{R}^3 e k_g a curvatura de γ em f .

Consideremos⁽⁵⁴⁾ a bijeção linear $df(u): T_u\mathbb{R}^2 \rightarrow T_u f \subset T_{f(u)}\mathbb{R}^3$. O produto interno em $T_{f(u)}\mathbb{R}^3$ induz a uma forma bilinear, simétrica g_u em $T_u f$. O produto interno em $T_{f(u)}\mathbb{R}^3$ composto com a transformação linear $df(u)$ induz a uma forma bilinear, simétrica g_u em $T_u\mathbb{R}^2$. Podemos identificar por meio da bijeção linear df essas duas definições da primeira forma fundamental, g_u :

Sejam $X, Y \in T_u\mathbb{R}^2$: $g_u(X, Y) = df_u X \cdot df_u Y$

Sejam $X, Y \in T_u f$: $g_u(X, Y) = X \cdot Y$

Def.15: A representação matricial da primeira forma fundamental, com relação a base f_1, f_2 será

$$g_{ik}(u) = f_i(u) \cdot f_k(u) \quad i, k = 1, 2$$

A primeira forma fundamental g de uma superfície f é definida positiva. Ela é invariante sob transformações de coordenadas. Se a transformação de coordenadas ϕ é expressa por $u^i = u^i(v^1, v^2)$ $i=1,2$, então a matriz fundamental \tilde{g} da superfície $\tilde{f} = f \circ \phi$ está relacionada a g da superfície f por

$$(\tilde{g})_{ij}(v) = \sum_{k, l} \frac{\partial u^k}{\partial v^i} \frac{\partial u^l}{\partial v^j} (g)_{kl}(\phi(v))$$

Os coeficientes da matriz g são funções diferenciáveis de U em \mathbb{R} , denominados coeficientes da métrica.

Um resultado importante consiste em que a curvatura geodésica de K_g em uma superfície pode ser medida em termos das funções g_{ij} .

Def.16^[50]: Uma geodésica em uma superfície M é uma curva γ parametrizada pelo comprimento de arco com curvatura geodésica igual a zero em todos os pontos.

Desde que a curvatura geodésica de uma curva plana é sua curvatura plana K isto significa que as linhas retas no plano são geodésicas.

Prop.3: Seja $\gamma(s)$ uma curva, M uma superfície onde a curva é expressa $\gamma(s) = f(\gamma^1(s), \gamma^2(s))$. A curva é uma geodésica se e

$$\frac{d}{ds} \gamma^k + \sum_{i, j} \Gamma_{ij}^k \frac{d}{ds} \gamma^i \frac{d}{ds} \gamma^j = 0$$

Def.17: Para uma superfície M com coeficientes métricos g_{ij} os

símbolos de Christoffel são definidos, a saber,

$$\left\{ \begin{matrix} i \\ \ell \end{matrix} \right\} = \Gamma_{ij}^{\ell} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^2 g^{k\ell} \left(\frac{\partial g_{ik}}{\partial u^j} + \frac{\partial g_{ij}}{\partial u^k} + \frac{\partial g_{kj}}{\partial u^i} \right)$$

Def.18: Um campo de vetores ao longo de uma curva $\gamma: [a,b] \rightarrow M \subset \mathbb{R}^3$ é uma função X que associa a cada $t \in [a,b]$ um vetor tangente a curva $\gamma(t)$. Um campo $X(t)$ ao longo de uma curva $\alpha(t)$ é diferenciável se como função $X: [a,b] \rightarrow \mathbb{R}^3$, ele é diferenciável.

O vetor $\frac{dX}{dt}$ ser normal à superfície M significa que não há componente tangencial na mudança de $X(t)$, quando t varia. Assim, um habitante "intrínseco" da superfície não detectaria mudanças em $X(t)$ ao longo de $\gamma(t)$. Este habitante veria os vetores $X(t_1)$ e $X(t_2)$ (para t_1 próximo a t_2) como paralelos se $\frac{dX}{dt}$ é normal.

Prop.4: Uma curva $\gamma(s)$ definida em M é uma geodésica, se, o campo $\frac{d^2\gamma(s)}{ds^2}$ é normal a M (múltiplo da normal η para a superfície) nos pontos que pertencem a curva.

Def.19: Um campo de vetores diferenciáveis $X(t)$ ao longo de γ é paralelo ao longo desta, se $\frac{dX}{dt}$ é perpendicular a γ .

Prop.5: Se $\gamma(t) = f(\gamma^1(t), \gamma^2(t))$ é uma curva descrita em uma superfície M e $X(t)$ é um campo de vetores diferenciáveis ao longo de $\gamma(t)$ então $X(t)$ é paralelo ao longo da curva se e

$$X = \sum_i X^i f_i \quad \frac{dX^k}{dt} + \sum_{ij} \Gamma_{ij}^k X^i \frac{d\gamma^j}{dt} = 0 \quad k = 1, 2$$

Observemos que a equação diferencial que o campo $X(t)$ deve satisfazer depende somente da curva $\gamma(t)$ e das grandezas Γ_{ij}^k . Portanto, o conceito de paralelo ao longo de uma curva é intrínseco à superfície (não depende do 'espaço ambiente' em que a superfície está imersa)⁽⁵⁰⁾.

Prop. 6: Seja $\gamma(t)$ uma curva regular em uma superfície M . Seja \tilde{X} um vetor tangente para M em $\gamma(t_0)$. Então existe um único campo $X(t)$ que é transportado paralelamente ao longo de $\gamma(t)$ com $X(t_0) = \tilde{X}$.

Def. 20^[50]: O único campo de vetores $X(t)$ paralelo ao longo de $\gamma(t)$ tal que $X(t_0) = \tilde{X}$ é denominado transportado paralelo de \tilde{X} ao longo da curva. O transporte paralelo de vetores preserva comprimento e ângulos.

A seguir comentaremos dois exemplos mostrando que a noção de transporte paralelo depende do caminho^[49]. No primeiro exemplo consideraremos dois meridianos γ, α na esfera S^2 definidos do pólo norte ao pólo sul. Seja \tilde{X} o vetor unitário tangente a γ no pólo norte. Se \tilde{X} é transportado paralelamente ao longo de γ até o pólo sul, obtemos um vetor unitário tangente à curva γ neste pólo, desde que γ seja uma geodésica. Se \tilde{X} é transportada paralelamente ao longo de α , \tilde{X} mantém um ângulo constante com $\frac{d\alpha}{ds}$ que é também paralelo. Seja θ o ângulo entre $\frac{d\gamma}{ds}$ e $\frac{d\alpha}{ds}$ no pólo norte. O ângulo entre os dois vetores transladados de \tilde{X} ao pólo sul é 2θ . Esta diferença angular é a área da região limitada por γ e α . (Veja figura VIa)

Em um segundo exemplo transportaremos um vetor ao longo de um "triângulo geodésico" e observaremos que o vetor não retorna ao original. Consideremos novamente a esfera. Seja γ_1 um segmento de um grande círculo do pólo norte a um ponto A no equador. Entre um ponto B no equador e o ponto A definamos a curva geodésica γ_2 . Seja γ_3 um segmento de um grande círculo que une o ponto B ao pólo norte N . Um vetor \tilde{X} pode ser transportado ao longo

de γ_1 do ponto N a A . Vamos a seguir, transportá-lo ao longo de até B e então ao longo de γ_3 até N . O resultado deste transporte é um vetor diferente de \tilde{X} . De fato, o ângulo θ entre os dois vetores em N é igual à área da região limitada por γ_1 , γ_2 e γ_3 . (Veja figura VIb)

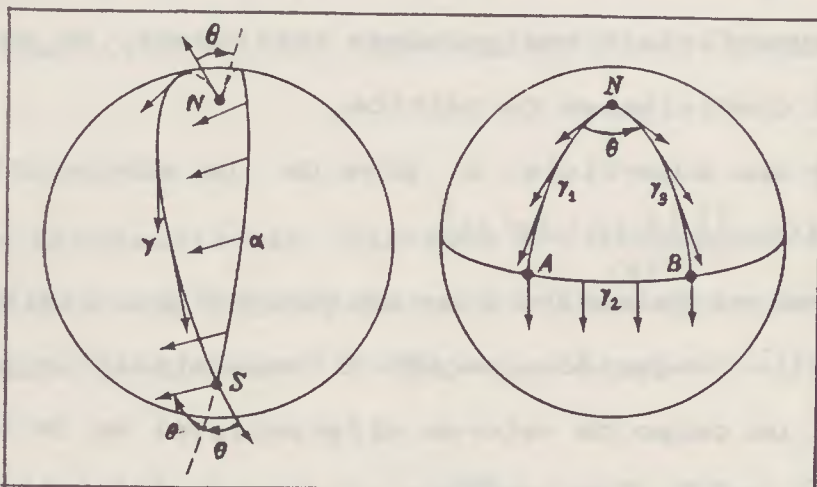


fig. VI A

fig. VI B

Def. 21^[54]: Seja $f: U \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$ uma superfície. A transformação
 $n_s: U \rightarrow S^2 \subset \mathbb{R}^3$ $u \mapsto n(u)$

é denominada transformação de Gauss. n associa a cada ponto μ um vetor normal $n(\mu)$ de f em $f(\mu)$, $n(\mu) \in T_{f(\mu)} \mathbb{R}^3$.

Prop. 7: A imagem de $dn_\mu: T_u \mathbb{R}^2 \rightarrow T_{f(u)} \mathbb{R}^3$ encontra-se em $T_{uf} \subset T_{f(u)} \mathbb{R}^3$.

Def. 22: A forma bilinear simétrica $-dn_u \cdot df_u: T_u \mathbb{R}^2 \times T_u \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$

é denominada a segunda forma fundamental de f em u , sendo denotada por II_u .

Def. 23: A transformação linear $L_u \doteq -dn_u \circ df_u^{-1}: T_{uf} \rightarrow T_{uf}$ é conhecida como transformação de Weingarten.

Para vetores $X, Y \in T_{\mu f}$ podemos expressar

$$II_u(X, Y) = L_u X \cdot Y$$

Prof.8: Seja M uma superfície. Se γ é uma curva, parametrizada pelo comprimento de arco, com tangente T , então $K_n = II(T, T)$.

Uma maneira de medir a curvatura de uma superfície envolve a mudança da normal n (ao longo de uma curva na superfície) conhecida como transformação de Weingarten L : $L(f_j) = -\frac{\partial n}{\partial u^j}$. O determinante de L é a curvatura gaussiana K . O Teorema Egregium de Gauss expressa que K de uma superfície é uma grandeza intrínseca, no sentido de K ser função dos coeficientes da métrica.

Def.24: Se M é uma superfície, a área de um subconjunto $R \subset M$ é

$$\text{definida por } A(R) = \iint_{f^{-1}(R)} |f_1 \wedge f_2| du^1 du^2$$

Prop.9: A curvatura gaussiana K em um ponto P é o limite da razão $A[n_S(R)] \cdot [A(R)]^{-1}$ quando a região R "se contrai" ao ponto P .

Def.25: Seja X um campo de vetores diferenciável em um aberto $V \subset M$

e $P \in V$. Seja $Y \in T_P M$. Consideremos a curva $\alpha = f \circ \gamma: (-\epsilon, \epsilon) \subset \mathbb{R} \rightarrow V$

onde $\gamma: (-\epsilon, \epsilon) \rightarrow U \subset \mathbb{R}^2$. Seja $X(t)$, $T \in (-\epsilon, \epsilon)$ a restrição

do campo X a curva α . Em $t = 0$, $\alpha(0) = P$ e $\frac{d\alpha}{dt}(0) = Y$.

Para $u \in U$, definamos $pr_u: T_{f(u)}\mathbb{R}^3 \rightarrow T_u f$ a projeção sobre o

plano $T_u f$ (ou $T_u M$), segundo a normal $n(u)$ à superfície. O vetor

obtido da $pr_u \circ \frac{dX}{dt}(0)$ é denominado a derivada covariante

em P do campo vetorial X em relação ao vetor Y . Denotaremos essa derivada covariante por $DX/dt(0)$ ou $\nabla_Y X(P)$.

Embora essa definição empregue o vetor normal à M e uma curva particular α , tangente à Y em P , o conceito de diferenciação covariante é intrínseco e não depende da escolha particular da curva α [50].

Def.26: Um campo de vetores X ao longo da curva $\alpha: (-\epsilon, \epsilon) \rightarrow M$ é

paralelo se $DX/dt = 0$ para todo $t \in (-\epsilon, \epsilon)$.

Def.27: Uma curva regular $\gamma: (-\epsilon, \epsilon) \rightarrow M$ é uma geodésica em $t \in (-\epsilon, \epsilon)$ se o campo de vetores $\frac{d\gamma}{dt}$ é paralelo ao longo de γ em t , a saber,

$$\frac{D}{dt} \left(\frac{d\gamma}{dt}(t) \right) = 0 .$$

γ é uma geodésica, se a curva é geodésica para todo $t \in (-\epsilon, \epsilon)$. As definições (16) e (27) são equivalentes, assim como, (19) e (26).

Variedades Diferenciáveis, Fibrados e o Transporte Paralelo

Assim como uma superfície parece localmente um aberto do \mathbb{R}^2 , uma variedade de dimensão n parecerá localmente com um aberto do \mathbb{R}^n .

Uma variedade diferenciável^[52] de dimensão- d , \mathcal{C}^k é um par (M, \mathcal{F}) consiste em um espaço localmente Euclidiano M de dimensão- d , segundo contável, munido de uma estrutura diferencial \mathcal{F} , \mathcal{C}^k . Usaremos a expressão suave para indicar diferenciabilidade \mathcal{C}^∞ . Uma variedade pode ser vista como uma tripla consistindo de um conjunto, uma topologia segundo contável localmente Euclidiana para esse conjunto e uma estrutura diferenciável (atlas).

Def.1: Um espaço M de dimensão d localmente Euclidiano é um espaço topológico M Hausdorff, no qual cada ponto tem uma vizinhança U_p homeomorfa a um conjunto aberto do \mathbb{R}^d . Se φ é um homeomorfismo de um conjunto aberto conexo $U \subset M$ sobre um subconjunto do \mathbb{R}^d , denominamos φ uma função coordenada e $\varphi_i = r_i \circ \varphi: M \rightarrow \mathbb{R}$ ($r_i: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$) a

i -ésima função coordenada. Ao par (U, φ) denominamos carta ou sistema de coordenadas.

Def. 2: Uma estrutura diferencial $\mathcal{F}, \mathcal{C}^k$ ($1 \leq k \leq \infty$) sobre um espaço M , localmente Euclideano, consiste em uma família de cartas

$\{(U_\alpha, \varphi_\alpha), \alpha \in A\}$, satisfazendo:

(a) $\bigcup_{\alpha \in A} U_\alpha = M$

(b) $\varphi_\alpha \circ \varphi_{\alpha'}^{-1}$ é de \mathcal{C}^k para todo $\alpha, \alpha' \in A$

(c) a família \mathcal{F} é maximal com relação a (b), ou seja, se (U, φ) é uma carta em que $\varphi \circ \varphi_\alpha^{-1}$ e $\varphi_\alpha \circ \varphi^{-1}$ constituem funções \mathcal{C}^k para todo $\alpha \in A$, então $(U, \varphi) \in \mathcal{F}$. (A é um conjunto de índices)

Se \mathcal{F}_0 é uma família de cartas satisfazendo (a) e (b), existe uma única estrutura diferencial \mathcal{F} que contém \mathcal{F}_0 .

Def. 3: A função $f: M^d \rightarrow N^p$ é diferenciável (ou \mathcal{C}^∞) se, para toda carta (U, φ) de M^d e (V, ψ) de N^p , a composição $\psi \circ f \circ \varphi^{-1}: \varphi(U \cap f^{-1}(V \cap f(U))) \rightarrow \psi(V)$ é \mathcal{C}^k .

Denotaremos por $C_x^\infty(M)$ ao conjunto das funções \mathcal{C}^∞ de uma vizinhança de x em \mathbb{R} . ($x \in M$)

Def. 4^[54]: Uma curva num ponto x e M é função \mathcal{C}^k definida

$\gamma: [a, b] \subset \mathbb{R} \rightarrow M$, tal que $\gamma(0) = p$ ($a < 0 < b$). Curvas γ_1 e γ_2

em p são equivalentes se $\frac{d}{dt}(\varphi \circ \gamma_1)(0) = \frac{d}{dt}(\varphi \circ \gamma_2)(0)$ para toda $\varphi: U \rightarrow \mathbb{R}^d$.

Uma classe de equivalência de curvas em p é denominada vetor tangente a p . O conjunto de todos os vetores tangentes a p é denotado por $T_p M$.

Def. 5: O vetor tangente à variedade M em p é a função $X_p: C_p^\infty \rightarrow \mathbb{R}$ que satisfaz, para todo $a \in \mathbb{R}$ e $f, g \in C_p^\infty$ as seguintes propriedades:

$$(i) X_p(f+g) = Xf + Xg$$

$$(ii) X_p(f \cdot g) = (Xf) \cdot g + f \cdot (Xg)$$

Neste sentido o $T_p M$ é o conjunto de todos os operadores X_p satisfazendo as propriedades (i) e (ii).

Teo. 1⁽⁵⁵⁾: Seja $f: M \rightarrow N$ uma função C^∞ . Essa função induz um homomorfismo f_* de $T_p M$ em $T_{f(p)} N$. f_* é denominada transformação jacobiana ou diferencial de f . Seja X_p um vetor $T_p M$. Definimos $f_* X_p$ como um elemento $T_{f(p)} N$. Considerando uma função $g \in C^\infty(f(p))$, o vetor $f_* X_p$ satisfaz a relação

$$f_*(X_p(g)) = X_{f(p)}(g \circ f)$$

Seja γ uma curva em M . Para cada $\bar{t} \in [a, b]$, o vetor tangente a γ pode ser expresso

$$\gamma_* \left(\frac{d}{dt} \Big|_{\bar{t}} f \right) = \frac{d}{dt} \Big|_{\bar{t}} (f \circ \gamma)$$

onde $f \in C^\infty(p)$. Em outras palavras, $\gamma_* \frac{d}{dt} \Big|_{\bar{t}} f$ é derivada de f na direção da curva $\gamma(t)$ em $t = \bar{t}$.

Def. 6⁽⁵²⁾: Um grupo de Lie G é uma variedade diferenciável também dotada de estrutura de grupo, tal que a aplicação $G \times G \rightarrow G$ definida por $(g, h) \rightarrow gh^{-1}$ é C^∞ ($g, h \in G$).

Denotaremos por L_g e R_g os seguintes difeomorfismos

$$L_g h = gh \quad R_g h = hg \quad \forall h \in G$$

Eles são denominados translação à esquerda e translação à direita de G por um elemento $g \in G$, respectivamente.

Def. 7: Um campo X em G é designado invariante à esquerda se ele é invariante por toda translação à esquerda L_g , $g \in G$:

$$(L_g)_* X_h = X_{gh} \quad \forall g, h \in G$$

Os campos à esquerda são diferenciáveis⁽⁵²⁾.

Prop.1: O conjunto de todos os campos invariantes à esquerda do grupo de Lie G forma uma álgebra de Lie sob a operação de comutação definida nos campos. Denotaremos este conjunto por \mathfrak{G} . A álgebra de Lie do grupo G é um espaço vetorial real. A função $\alpha: \mathfrak{G} \rightarrow T_e G$, definida por $\alpha(X) = Xe$ é um isomorfismo de \mathfrak{G} no espaço tangente a G na unidade e . Portanto, $\dim \mathfrak{G} = \dim T_e G = \dim G$.

Def.8: Seja G um grupo de Lie e M uma variedade \mathcal{C}^∞ . Uma ação de G em M é a função

$$R: M \times G \rightarrow M$$

satisfazendo

$$(i) R(p, e) = p \quad \forall p \in M \quad e: \text{elemento identidade de } G$$

$$(ii) R(R(p, g), h) = R(p, gh) \quad \forall p \in M \quad \forall g, h \in G$$

R é denominada ação à direita de G em M e assumimos R uma função de \mathcal{C}^∞ .

Consideremos a função \mathcal{C}^∞

$$L: G \times M \rightarrow M \quad \text{tal que}$$

$$(i) L(e, p) = p$$

$$(ii) L(g, L(h, p)) = L(gh, p)$$

para todo $g, h \in G$ e $p \in M$. L é denominada ação à esquerda de G em M .

Def.9: A ação é efetiva se para todo $p \in M$, $R(p, g) = p$ implicar $g = e$.

Def.10⁽⁵²⁾: Sejam G e H grupos de Lie. Se $\varphi: G \rightarrow H$ é um homomorfismo algébrico entre os grupos de Lie e também uma função \mathcal{C}^∞ , denominamos φ : um homomorfismo de grupos de Lie. Diz-se que φ é

um isomorfismo de grupos de Lie se ele for um difeomorfismo e um homomorfismo de grupos de Lie. Um isomorfismo de um grupo de Lie em si mesmo é denominado um automorfismo. Se H é o conjunto dos automorfismos de um espaço vetorial V , ou se H é o grupo das matrizes inversíveis reais ou das matrizes inversíveis complexas, então o homomorfismo $\psi : G \rightarrow H$ é denominado representação do grupo de Lie G .

Se \mathfrak{g} e \mathfrak{h} são álgebras de Lie, a função $\psi : \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{h}$ é um homomorfismo de álgebras de Lie se ela é linear e preserva as relações de comutação entre os elementos da álgebra $\psi [X, Y] = [\psi (X), \psi (Y)]$, $X, Y \in \mathfrak{g}$. Se um homomorfismo ψ é também uma função bijetora, então denominamos ψ : um isomorfismo. Um isomorfismo de \mathfrak{g} em si mesma é chamado de automorfismo.

Teo. 2^[52]: Sejam G e H grupos de Lie com álgebras (de Lie) \mathfrak{g} e \mathfrak{h} , respectivamente. Se $\varphi : G \rightarrow H$ é um homomorfismo, então $d\varphi : \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{h}$ é um homomorfismo de álgebras de Lie.

Def. 11: Seja g um elemento do grupo de Lie G . Definimos um difeomorfismo g , a saber,

$$g : G \rightarrow G \quad g : h \mapsto ghg^{-1}$$

A representação adjunta do grupo G é definida pela aplicação Ad

$$\begin{aligned} Ad : G &\rightarrow \text{Aut}(\mathfrak{g}) \\ g &\mapsto g_* = dg \end{aligned} \quad \text{Aut}(\mathfrak{g}) = \{ \psi : \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g} \mid \psi \text{ automorfismo} \}$$

A diferencial $d(Ad) = Ad_* \doteq ad$ associa um elemento de \mathfrak{g} a outro da álgebra de Lie de $\text{Aut}(\mathfrak{g})$, a saber,

$$ad : \mathfrak{g} \rightarrow \text{End } \mathfrak{g}$$

Observemos que Ad e ad apresentam as seguintes propriedades^[52]:

$$(a) \text{Ad}(g^{-1}) = (\text{Ad}(g))^{-1}$$

$$(b) \text{Ad}(g)[X, Y] = [\text{Ad}(g)X, \text{Ad}(g)Y] \quad X, Y \in \mathfrak{g}$$

$$(c) \text{ad}(X)Y = [X, Y]$$

(d) Ad e ad são homomorfismos de G e da álgebra de Lie \mathfrak{g} , respectivamente.

Not.: Sejam E e F espaços vetoriais sobre \mathbb{R} . O espaço dual a E é denotado por E^* . Para $p, q > 0$, $T^{p,q}(E, F)$ representa o espaço das

transformações multilineares (tensores a valores em F)

$$f: \underbrace{E^* \times \dots \times E^*}_p \times \underbrace{E \times \dots \times E}_q \rightarrow F. \quad T^{0,0}(E, F) \text{ é o espaço } F.$$

Consideremos uma base (para E) formada pelos vetores e_1, \dots, e_n e sua base dual constituída dos vetores e^1, \dots, e^n . Um elemento

$f \in T^{p,q}(E, \mathbb{R})$ pode ser expresso da seguinte maneira

$$f = \sum f_{j_1, \dots, j_q}^{i_1, \dots, i_p} e_{i_1} \otimes \dots \otimes e_{i_p} \otimes e^{*j_1} \otimes \dots \otimes e^{*j_q}$$

onde os coeficientes $f_{j_1, \dots, j_q}^{i_1, \dots, i_p}$ pertencem a \mathbb{R} .

Seja $\Lambda^K(E, F)$ o subespaço de $T^{0,K}(E, F)$ constituído das transformações K - multilineares f em que f (u_1, \dots, u_n) é antisimétrica com relação a $u_1, \dots, u_n \in E$. $\Lambda^0(E, F)$ representa o espaço F. Para $\omega \in \Lambda^K(E, \mathbb{R})$,

$$\omega = \sum \omega_{i_1, \dots, i_K} e^{*i_1} \otimes \dots \otimes e^{*i_K}$$

em que ω_{i_1, \dots, i_K} é antisimétrico "com relação aos índices" i_1, \dots, i_K ($\omega_{i_1, \dots, i_K} \in \mathbb{R}$).

Def. 12^[54]: Seja $u_1, \dots, u_i, \dots, u_{i+j}$ um conjunto de vetores de E. Para

$\alpha \in \Lambda^i(E, \mathbb{R})$ e $\beta \in \Lambda^j(E, \mathbb{R})$, definimos

$$(\alpha \wedge \beta)(u_1, \dots, u_{i+j}) = \frac{1}{i!j!} \sum_{\sigma} (-1)^\sigma \alpha(u_{\sigma(1)}, \dots, u_{\sigma(i)}) \beta(u_{\sigma(i+1)}, \dots, u_{\sigma(i+j)})$$

onde a soma é sobre o conjunto de todas as permutações σ de

$(1, \dots, 1 + j)$ e $(-1)^\sigma = \pm 1$ é o sinal de σ .

Def.13: Uma métrica em E é um elemento g do espaço $T^{0,2}(E, \mathbb{R})$, tal que g é simétrica e não-degenerada (para todo $v \in E$, se $g(v, v) = 0$, então v é o vetor 0).

Def.14: Seja $T^{p,q}(M, \mathbb{R}) = \bigcup_{x \in M} T^{p,q}(T_x M, \mathbb{R})$. Uma 1-forma ou uma forma diferencial de grau 1 em M é a função $\alpha: M \rightarrow T^{0,1}(M, \mathbb{R})$ tal que $\alpha_x \in T^{0,1}(T_x M, \mathbb{R})$ e (para qualquer campo Y em MD a função $\alpha_x(Y_x)$ é $C^\infty(M)$).

Def.15: Um campo tensorial do tipo (p, q) sobre M corresponde a função $S: M \rightarrow T^{p,q}(M, \mathbb{R})$ tal que $S_x \in T^{p,q}(T_x M, \mathbb{R})$ e (para todo conjunto de 1-formas $\alpha_1, \dots, \alpha_p$ e todo conjunto de campos Y_1, \dots, Y_q definidos em MD a função $S(\alpha_1, \dots, \alpha_p, Y_1, \dots, Y_q)(x)$ é $C^\infty(MD)$. Denotaremos o espaço de todos os campos tensoriais do tipo (p, q) em M por $\mathcal{T}^{p,q}(M, \mathbb{R})$.

Def.16: Uma k -forma em M é o campo tensorial $\omega \in \mathcal{T}^{0,k}(M, \mathbb{R})$ em que $\omega_x \in \Lambda^k(T_x M, \mathbb{R})$. O espaço das k -formas em M é denotado por $\Lambda^k(M, \mathbb{R})$. Se $\varphi: U \subset M \rightarrow \mathbb{R}^n$ é uma função coordenada $x_i = \varphi_i$ a i -ésima função coordenada ($x^i: U \subset M \rightarrow \mathbb{R}, x^i \in C^\infty$), então dx^i é uma 1-forma em U caracterizada por $dx^i(\partial_j) = \delta^i_j$ (∂_j corresponde a um vetor da base do $TM|_U$). Um elemento $\omega \in \Lambda^k(M, \mathbb{R})$ pode ser expresso na vizinhança U

$$\omega = \frac{1}{k!} \sum \omega_{i_1, \dots, i_k} dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_k}$$

onde $\omega_{i_1, \dots, i_k} = \omega(\partial_{i_1}, \dots, \partial_{i_k})$ é $C^\infty(MD)$ e \wedge representa o produto exterior de formas.

Prop.2⁽⁵⁹⁾: Seja M uma variedade. Existe uma única operação $d: \Lambda^k(M, \mathbb{R}) \rightarrow \Lambda^{k+1}(M, \mathbb{R})$ em M denominada diferencial exterior, que

apresenta as seguintes propriedades:

(a) Se $f: M \rightarrow \mathbb{R}$ é C^∞ , então df é a diferencial definida por

$$df(Y) = Y[f] \quad (Y: \text{um campo pertencente a } TM)$$

(b) Se $\alpha \in \Lambda^i(M, \mathbb{R})$ e $\beta \in \Lambda^j(M, \mathbb{R})$ então: $d(\alpha \wedge \beta) = d\alpha \wedge \beta + (-1)^i \alpha \wedge d\beta$

(c) d é linear

(d) $d^2 = d \circ d = 0$

Def.17: Uma forma $\omega \in \Lambda^k(M, \mathbb{R})$ é fechada se $d\omega = 0$ e denominada exata se $\omega = d\alpha$ para uma forma diferencial $\alpha \in \Lambda^{k-1}(M, \mathbb{R})$.

Def.18: Uma métrica em M é um campo $g \in \mathcal{T}^{0,2}(M, \mathbb{R})$ tal que g_x é uma métrica em $T_x M$.

Def.19⁽⁵⁶⁾: Seja V um espaço vetorial com base v_1, v_2, \dots, v_m .

Consideremos o conjunto de k -formas diferenciais $\alpha^1, \dots, \alpha^m \in \Lambda^k(M, \mathbb{R})$.

A função $X \mapsto \alpha^1_X v_1 + \dots + \alpha^m_X v_m$ é designada k -forma à valores em

V . O espaço das k -formas à valores em V é denotado por $\Lambda^k(M, V)$.

Def.20⁽⁵⁸⁾: Seja M uma variedade e G um grupo de Lie. Um fibrado principal diferenciável (PFB) sobre M consiste de uma variedade P e a ação de G em P , satisfazendo as seguintes condições:

(i) G age livremente em P à direita: $(p, g) \in P \times G \rightarrow pg = R_g p \in P$

(ii) M é o espaço quociente de P pela relação de equivalência induzida por G , $M = P/G$, e a projeção canônica $\pi: P \rightarrow M$ é uma função diferenciável.

(iii) todo ponto $x \in M$ possui uma vizinhança U , tal que $\pi^{-1}(U)$ é isomorfo a $U \times G$. Existe um difeomorfismo $\Psi: \pi^{-1}(U) \rightarrow U \times G$ de modo que $\Psi(p) = (\pi(p), \varphi(p))$, onde φ é uma função de $\pi^{-1}(U)$ em G satisfazendo $\varphi(pg) = \varphi(p)g$ para todo $p \in \pi^{-1}(U)$ e $g \in G$. P é localmente trivial.

Denotaremos o PFB por $P(M, G, \pi)$. Designamos P o espaço fibrado, M a variedade de base, G o grupo de estrutura e π a projeção. Para cada $x \in M$, $\pi^{-1}(x)$ é uma subvariedade fechada de P designada a fibra sobre x . Se p é um ponto de $\pi^{-1}(x)$, então a fibra sobre x é o conjunto de pontos pg , $g \in G$, denominada fibra em p . Toda fibra é difeomorfa a G , pois $\psi : \pi^{-1}(p) \rightarrow \langle p \rangle \times G$ é um difeomorfismo. ψ é denominado trivialização local ou "uma escolha de Gauge".

Def.21: Uma secção local num fibrado principal P é uma aplicação diferenciável de um aberto U de M em P

$$\sigma_U : U \subset M \rightarrow P$$

tal que a composição $\pi \circ \sigma_U = \mathbb{1}_U$ é a identidade no aberto U .

Prop.2: Seja M uma variedade, $\{U_\alpha\}$ uma cobertura de abertos da variedade e G um grupo de Lie. Consideremos funções

$g_{\beta\alpha} : U_\alpha \cap U_\beta \rightarrow G$ definidas para todo conjunto não-vazio, que satisfaçam a relação $g_{\gamma\alpha}(x) = g_{\gamma\beta}(x) \cdot g_{\beta\alpha}(x)$ para $x \in U_\alpha \cap U_\beta \cap U_\gamma$. Logo, podemos construir um fibrado principal diferenciável $P(M, G)$ com funções de transição $g_{\beta\alpha}$.

Def.22: Seja $P(M, G, \pi)$ um fibrado principal e F uma variedade em que G age à esquerda: $(g, \xi) \in G \times F \mapsto g\xi \in F$. Se G age à direita na variedade produto $P \times F$, logo, um elemento $g \in G$ associa $(p, \xi) \in P \times F$ a $(pg, g^{-1}\xi) \in P \times F$. O espaço quociente de $P \times F$ pela ação de G é denotado $E = P \times F / G$. Este espaço consiste das classes de equivalência

$$[(p, \xi)] = \{(\bar{p}, \bar{\xi}) \in P \times F \mid (\bar{p}, \bar{\xi}) \sim_G (p, \xi)\}$$

onde $(\bar{p}, \bar{\xi}) \sim_G (p, \xi) \iff \exists g \in G \mid \bar{p} = pg \text{ e } \bar{\xi} = g^{-1}\xi$

A função $P \times F \rightarrow M$ que associa (p, ξ) a $\pi(p)$ induz uma função π_E , denominada projeção de E em M . Para cada $x \in M$, o conjunto $\pi^{-1}(x)$ é denominado fibra de E sobre x . Todo ponto x de M possui uma vizinhança U tal que $\pi^{-1}(U)$ é isomorfa a $U \times G$. Identificando $\pi^{-1}(U)$ com $U \times G$, vemos que a ação de G em $\pi^{-1}(U) \times F$ à direita é dada por

$$(x, g, \xi) \longmapsto (x, gh, h^{-1}\xi) \quad (x, g, \xi) \in U \times G \times F \quad h \in G$$

O isomorfismo entre $\pi^{-1}(U)$ e $U \times G$ induz um isomorfismo entre π_E^{-1} e $U \times F$. Introduzimos uma estrutura diferencial em E impondo que $\pi_E^{-1}(U)$ é uma subvariedade aberta de E , difeomorfa a $U \times F$. A projeção π_E é então uma função diferenciável de E em M . Denominamos $E(M, F, G, P)$ fibrado associado a P .

Neste sentido, o fibrado tangente TM é associado ao fibrado das bases LCM , onde a fibra é o \mathbb{R}^n e grupo de estrutura $GL(n, \mathbb{R})$. Um campo de vetores será uma secção em TM ⁽⁵⁸⁾.

A projeção inversa $\pi^{-1}(x)$ é uma subvariedade diferenciável de E , denominada fibra sobre x . Se esta é homeomorfa a G o fibrado é dito principal. Se a fibra for um espaço vetorial, sobre o qual age uma representação de G , o fibrado é denominado associado.

Def.23: A imagem do homomorfismo $\varphi: \mathbb{R} \rightarrow G$ é denominada subgrupo a 1-parâmetro de G .

Teor.4 ⁽⁵²⁾: Existe uma função bijetora entre os subgrupos a 1-parâmetro de G e os elementos de $T_e G$ (e : é a identidade de G).

Def.24: Seja X um elemento da álgebra de Lie \mathfrak{g} e φ_x o subgrupo a 1-parâmetro de G associado a X . Definimos a função exponencial

$\exp: \mathfrak{g} \rightarrow G$ por $\exp: X \mapsto \exp(X) = \varphi_X(1)$

Teor. 4⁽⁵²⁾: Seja X um elemento de \mathfrak{g} .

(a) $\exp(tX) = \varphi_X(t)$ para todo $t \in \mathbb{R}$

(b) $\exp(t_1 + t_2)X = (\exp t_1 X)(\exp t_2 X)$ para todo $t_1, t_2 \in \mathbb{R}$

(c) $\exp(-tX) = (\exp tX)^{-1}$

(d) a função \exp é um difeomorfismo entre a vizinhança de 0 em \mathfrak{g} e uma vizinhança de e em G .

Not.: Se M é uma variedade, representaremos por $\mathcal{X}(M)$ o conjunto dos campos vetoriais sobre M (secções em TM).

Def. 25: Seja X , um elemento da álgebra de Lie de G . A ação do subgrupo a 1 parâmetro $\varphi_t(X) = \exp(tX)$ em P , a saber

$$(p, \varphi_X(t)) \mapsto p \exp(tX)$$

induz um campo no fibrado, denominado campo fundamental correspondente a X , definido na seguinte forma

$$X_p^* = \left. \frac{d}{dt} (p \exp(tX)) \right|_{t=0}$$

Prop. 3⁽⁵²⁾: Seja X^* o campo fundamental correspondente a X pertencente a \mathfrak{g} . O campo fundamental correspondente a $\text{Ad}(g^{-1})X$ é dado por $dR(g)X^*$. O campo fundamental X_p^* é tangente a fibra $\pi^{-1}(g)$ para todo p pertencente a P . Denotamos o subespaço de $T_p P$ tangente a fibra no ponto p por V_p . ($d\pi(X^*) = 0$).

Def. 26: Uma forma conexão A_p num fibrado principal P é uma forma diferencial de grau 1 definida sobre P a valores na álgebra de Lie \mathfrak{g} do grupo de estrutura G , a saber

$$A_p: T_p P \rightarrow \mathfrak{g}$$

Esta apresenta as seguintes propriedades:

$$(a) A_p(X^*) = X \text{ se } X^* \in V_p, A_p(X) = 0 \text{ se } X \in V_p$$

$$(b) dR(g)A_p = Ad(g^{-1})A_p$$

Para todo $X_p \in T_p P$, $g \in G$, $p \in P$ verifica-se que

$$A_{pg}(dR(g)X_p) = ad(g^{-1})A_p X_p$$

Denominamos o espaço dos vetores $Y \in T_p P$, que se anulam sob a ação da conexão A_p , o espaço horizontal H_p . Todo vetor $X \in T_p P$ pode ser decomposto numa componente vertical $X_v \in V_p$ e numa horizontal $X_h \in H_p$. A um campo X pertencente a $\mathfrak{X}(M)$ está associado univocamente um campo \tilde{X} pertencente a $\mathfrak{X}(M)$ que satisfaz

$$\tilde{X}_p \in H_p \quad d\pi(\tilde{X}_p) = X_{\pi(p)}$$

\tilde{X} é denominado levantamento horizontal de X . Este campo é invariante por dR_g .

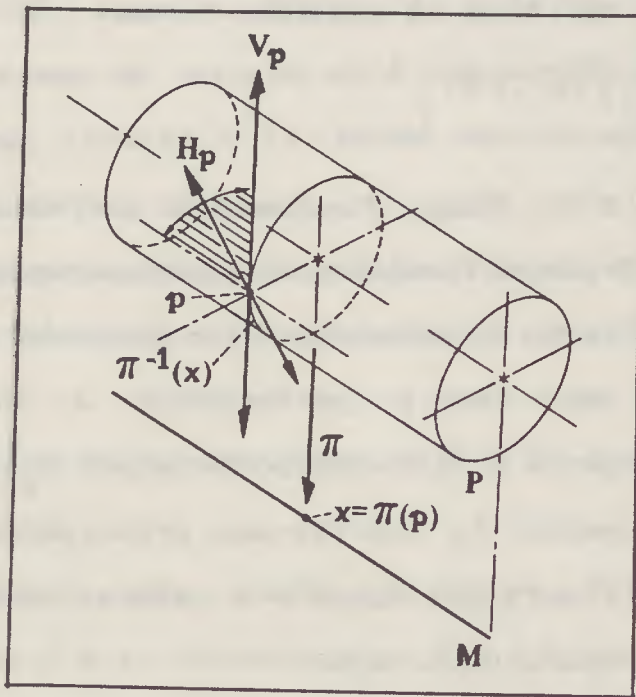


fig. VII

Sejam $\Psi_U : \pi^{-1}(U) \rightarrow U \times G$ e $\Psi_V : \pi^{-1}(V) \rightarrow V \times G$ trivializações locais de um fibrado principal P com grupo de estrutura G . As funções de transição g_{UV} de Ψ_U para Ψ_V são definidas para cada $x \in \pi^{-1}(U \cap V)$ (em função de $\varphi : \pi^{-1}(x) \rightarrow G$) na forma $g_{UV} = \Psi_U(p) \cdot \Psi_V^{-1}(p)$. Em $U \cap V$, quando efetuamos uma mudança de secções triviais, Ψ_U para Ψ_V , as projeções locais $\omega_U = \sigma_U^* \omega$ e $\omega_V = \sigma_V^* \omega$ da conexão ω nos abertos U e V , respectivamente, se relacionam por

$$\omega_V = g_{UV}^{-1} dg_{UV} + g_{UV}^{-1} \omega_U g_{UV}$$

As projeções ω_U e ω_V são formas diferenciais a valores em $\mathcal{G}l(n, \mathbb{R})$ (espaço vetorial das matrizes $n \times n$ reais)

$$\omega_U(x) = T_x U \rightarrow \mathcal{G}l(n, \mathbb{R})$$

$$\omega_V(x) = T_x V \rightarrow \mathcal{G}l(n, \mathbb{R})$$

Seja $\{J_\alpha\}$ uma base de \mathcal{G} do grupo de estrutura G . A conexão A definida em P pode ser expressa por

$$A = J_\alpha A^\alpha$$

Logo, obtemos a projeção $A_U \in \Lambda^1(U, \mathbb{R})$

$$A_U = \sigma_U^* A = \sigma_U^* (J_\alpha A^\alpha) = J_\alpha (\sigma_U^* A^\alpha) = J_\alpha A_U^\alpha$$

em função das formas de grau 1: A_U^α . Estas expressas em termos da base $\{dx^i\}$

$$A_U^\alpha = A^\alpha_\beta dx^\beta$$

apresentam componentes $A^\alpha_\beta = A^\alpha_U(\partial_\beta)$ conhecidas por potenciais de Gauge.

Def. 27: Seja θ um elemento de $\Lambda^k(P, \mathcal{G})$ e X_1, \dots, X_k elementos de $T_p P$. Definimos $\theta^H \in \Lambda^k(P, \mathcal{G})$ por $\theta^H(X_1, \dots, X_k) = (\theta(X_1, \dots, X_k))$, onde $X_{1h}, \dots, X_{kh} \in H_p$

Def. 28: A derivada exterior covariante de $\theta \in \Lambda^k(P, \mathfrak{g})$ é definida $(d\theta)^H \in \Lambda^{k+1}(P, \mathfrak{g})$ em função da derivada exterior de θ ($d\theta$). Denotaremos $(d\theta)^H$ por $D^\omega \theta$, com o propósito de destacar que D depende da conexão ω definida em P .

Def. 29: A curvatura da conexão $\omega \in \Lambda^1(P, \mathfrak{g})$ é definida

$$\Omega^\omega \doteq D^\omega \omega \in \Lambda^2(P, \mathfrak{g})$$

Teor. 5: (Equação estrutural de Cartan) A forma curvatura satisfaz a seguinte igualdade

$$\Omega^\omega = D^\omega \omega = d\omega + \frac{1}{2} [\omega, \omega]$$

Se $\{J_\alpha\}$ é uma base da álgebra de Lie \mathfrak{g} , a conexão A em P pode ser expressa $A = J_\alpha A^\alpha$. Portanto, o comutador $[A, A]$ pode ser reescrito na forma: $[A, A] = [J_\alpha A^\alpha, J_\beta A^\beta] = [J_\alpha, J_\beta] A^\alpha \wedge A^\beta$.

A curvatura F_U (campo de Gauge) associada ao potencial A é definida pela projeção $F_U = \sigma_U^* \Omega$. Podemos calcular a curvatura F_U em função de A_U , a saber, $F_U = dA_U + \frac{1}{2} [A_U, A_U]$.

Teor. 6⁽⁵⁴⁾: Sejam ψ_U e ψ_V duas trivializações locais em P , com função de transição $g_{UV} : U \times V \rightarrow G$. Em $U \cap V$, uma mudança de secções triviais, de ψ_U para ψ_V (uma transformação de Gauge) corresponde a uma transformação nas curvaturas F projetadas (campos), a saber,

$$F_V = g_{UV}^{-1} F_U g_{UV}$$

Def. 30⁽⁵⁴⁾: Uma conexão linear em P é a função que associa pares de campos $\zeta^\infty : X \bullet Y$ em M a um outro campo $\zeta^\infty : \nabla_X Y$ em M tal que

(a) $\nabla_X Y$ é \mathbb{R} -bilinear em X e Y , e

(b) para $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ suave (ζ^∞),

$$\nabla_{fX} Y = f \cdot \nabla_X Y \quad \text{e} \quad \nabla_X (fY) = f \nabla_X Y + X(f)Y$$

Denominamos $\nabla_X Y$ a derivada covariante de Y ao longo de X . Em uma carta local de M com coordenadas $\varphi = (x^1, \dots, x^n)$ definimos as funções $\Gamma_{jk}^i(\varphi)$ por

$$\nabla_{\frac{\partial}{\partial x^j}} \left(\frac{\partial}{\partial x^k} \right) = \Gamma_{jk}^i \frac{\partial}{\partial x^i}$$

Estas funções Γ_{jk}^i são denominadas símbolos de Christoffel da conexão. Nesta carta as componentes de $(\nabla_X Y)^i$ são expressas, a saber,

$$(\nabla_X Y)^i = \left(\frac{\partial}{\partial x^j} Y^i \right) X^j + \Gamma_{jk}^i X^j X^k$$

Def. 31^[54]: Se $\gamma(t)$ é uma curva e X é um campo vetorial, definimos a derivada covariante de X ao longo de γ por

$$\frac{D}{dt}(X) = \nabla_{\frac{d}{dt}\gamma} (X)$$

Um campo é paralelo ao longo de γ se $\frac{DX}{dt} = 0$. Denominamos a curva γ uma geodésica se $\frac{d\gamma}{dt}$ é paralela ao longo de γ .

Prop. 4^[58]: Seja $\tau = \varphi_t$ uma curva \mathcal{C}^1 em M . ($0 \leq t \leq 1$). Para um ponto p_0 em P ($\pi(p_0) = x_0$) existe uma única curva horizontal $\tau^* = \theta_t$ associada a τ que se inicia no ponto p_0 . Uma curva horizontal em P é uma função \mathcal{C}^1 cujos vetores tangentes são todos horizontais (pertencem ao espaço horizontal H). A curva horizontal τ^* que se inicia no ponto p_0 apresenta um ponto final em p_1 ($\pi(p_1) = x_1$). Variando p_0 na fibra $\pi^{-1}(x_0)$ obtemos uma função da fibra $\pi^{-1}(x_0)$ na fibra $\pi^{-1}(x_1)$. Denotaremos essa função por τ . Ela é um isomorfismo de $\pi^{-1}(x_0)$ em $\pi^{-1}(x_1)$, conhecida como transporte paralelo ao longo da curva τ .

Prop. 5^[59]: (a) Se τ é uma curva \mathcal{C}^1 em M , então o transporte

paralelo ao longo de τ^{-1} é o inverso do transporte ao longo de τ .

(b) Se τ é uma curva do ponto y ao ponto z em M e μ é uma curva de z a W em M , então o transporte paralelo ao longo da curva $\mu \circ \tau$ é a composição dos transportes paralelos ao longo de τ e μ .

Seja D uma conexão em $P(M, G)$. Para um ponto $x \in M$, H_x denotará o conjunto das isomorfismos de $\pi^{-1}(x)$ em si mesmo, obtidos por transporte paralelo ao longo de curvas fechadas em x .

Seja $C(x)$ o espaço de laços em x . O conjunto H_x forma um grupo denominado grupo de holonomia da conexão (vide proposição

5). Se M é conexa, H_x é isomorfo a H_y para todo $y, y \in M$. Se

D é "flat" então $H_x = 0$. Se M é a esfera unitária em \mathbb{R}^3 e D é a conexão riemanniana, então $H = SO(2, \mathbb{R})$.

O Espaço Projetivo

Em Mecânica Quântica, o estado de um sistema é representado por um vetor $|\psi\rangle$ pertencente ao espaço de Hilbert \mathcal{H} . Este vetor pertence a um subespaço unidimensional de \mathcal{H} , definido pelos vetores da forma $\xi|\psi\rangle$ onde ξ pertence a \mathbb{C}^* (complexos, não-nulos).

O espaço quociente de \mathcal{H} pelo grupo \mathbb{C}^* é denominado projetivo $\mathbb{C}P$.

Os elementos de $\mathbb{C}P$ denominamos raios, que representam os estados físicos de um sistema. Se o espaço \mathcal{H} tem dimensão $n + 1$, logo, o projetivo tem dimensão n e o denotaremos por $\mathbb{C}P_n$.

Consideremos o espaço \mathcal{H} de dimensão $n + 1$ ^[29]. Ele é isomorfo a \mathbb{C}^{n+1} . Um estado quântico será representado em \mathcal{H} por $n + 1$ -uplas de coordenadas complexas, a saber,

$$|\psi\rangle = |z^0, \dots, z^n\rangle.$$

Um estado normalizado pertence à esfera unitária S^{n+1} contida em \mathbb{C}^{n+1} :

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \delta_{ab} \bar{z}^a z^b = \bar{z}^b z^b = 1 \quad a, b = 0, \dots, n$$

O espaço dos raios caracteriza-se pelo conjunto das linhas de \mathbb{C}^{n+1} , que passam pela origem.

Em um aberto U^j , supomos que a coordenada z^j é diferente de zero. O espaço projetivo é recoberto por meio de $n + 1$ abertos U^0, U^1, \dots, U^n . Em U^j podemos usar como coordenadas locais para o $\mathbb{C}P_n$ as n razões

$$w^i = z^i \cdot (z^j)^{-1}$$

onde omitimos $w^j = z^j \cdot (z^j)^{-1}$. Estas coordenadas definidas em cada aberto podem não ser estendíveis para todo $\mathbb{C}P_n$. No entanto, o espaço projetivo é descrito pelas coordenadas locais em cada aberto e pela função transição na intersecção de dois abertos. O $\mathbb{C}P_n$ é um exemplo de variedade homogênea.

Existe um "line bundle" natural sobre o $\mathbb{C}P_n$. Este fibrado vetorial tem como base o espaço projetivo. A fibra sobre um ponto do $\mathbb{C}P_n$ consiste no conjunto dos estados que pertencem ao raio associado àquele ponto. O grupo de estrutura do "line bundle" é \mathbb{C}^* .

No exemplo de uma partícula de spin $1/2$ na presença de um campo magnético, o espaço de Hilbert tem dimensão 2 e o projetivo dos raios constitui o $\mathbb{C}P_1$. O autovalor \hat{H} , correspondente a um ponto do espaço de parâmetros, determina um raio de autovetores. Quando $\mathbb{R}(t)$ variam, o autovalor do operador energia caracteriza uma função do espaço de parâmetros em $\mathbb{C}P_1$. Esta função determina um fibrado natural sobre $\mathbb{C}P_1$, a saber, um "line

bundle" sobre o espaço de parâmetros S^2 .

Consideremos uma partícula de spin $1/2$ cujo estado satisfaz a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad (1)$$

a hamiltoniana $H(t)$ varia continuamente ao longo de um ciclo no qual $H(-\infty) = H(\infty)$. Sua forma é a seguinte

$$\hat{H}(t) = R(t)\sigma \quad (2)$$

onde $R = (x, y, z)$ e $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ é um operador vetorial, cujas componentes são as matrizes de Pauli. Um autoestado instantâneo de H com energia $E_n(t)$ é caracterizado pela equação

$$\hat{H} |\Psi_n(t)\rangle = E_n |\Psi_n(t)\rangle \quad (3)$$

Esta equação de autovalores define $|\Psi_n(t)\rangle$ a menos de uma fase dependente do tempo. No entanto, tornamos o autoestado univocamente determinado, impondo que⁽⁸⁷⁾

$$\langle \Psi_n | \frac{d}{dt} \Psi_n \rangle = 0 \quad (4)$$

Obtém-se o autoestado $|\Psi_n(t)\rangle$ da ação de um operador unitário $U(t)$ sobre o autoestado original $|\Psi_n(-\infty)\rangle$

$$U(t) |\Psi_n(-\infty)\rangle = |\Psi_n(t)\rangle \quad (5)$$

Vamos denota-los por $|+\rangle$ e $|-\rangle$. A equação de evolução (5) para os autoestados $|+\rangle$ e $|-\rangle$ se apresenta sob a seguinte forma:

$$U(t) |\pm(-\infty)\rangle = |\pm(t)\rangle \quad (6)$$

Derivando a equação (6) em relação a t e usando $U^\dagger |\pm(t)\rangle = |\pm(-\infty)\rangle$ resulta

$$\left(\frac{\partial U}{\partial t} \right) U^\dagger |\pm(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t} |\pm(t)\rangle \quad (7)$$

Sabemos que para este sistema de dois estados: $|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-| = \mathbb{1}$ e $\langle+|-\rangle = 0$. Analisando (7), percebemos que

$$\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right) = \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} |+\rangle\right) \langle +| + \left(\frac{\partial}{\partial t} |-\rangle\right) \langle -| \right] U \quad (8)$$

satisfaz esta equação.

Vamos introduzir em nosso tratamento^[57] um triedro formado pelos vetores \mathbf{r} , \mathbf{v} e \mathbf{w} e dois escalares positivos $R(t)$, $V(t)$, que satisfazem

$$\mathbf{R} = R\mathbf{r} \quad \dot{\mathbf{r}} = V\mathbf{v} \quad \mathbf{w} = \mathbf{r} \wedge \mathbf{v} \quad (9)$$

Escolhemos \mathbf{r} como um vetor na direção radial a esfera. Representaremos o ciclo de $H(t)$ pelo transporte do triedro \mathbf{r} , \mathbf{v} , \mathbf{w} ao longo de um laço Γ . Este é definido na esfera das direções do vetor $\mathbf{R}(t)$. Assim, mostraremos que o operador unitário $U(t)$ (8) transforma os autoestados originais $|\pm(-\infty)\rangle$ em $|\pm(t)\rangle$ por meio de um série de rotações infinitesimais. A velocidade angular instantânea de rotação é univocamente determinada por (4) e corresponde à velocidade angular $\Omega(t)$ de um referencial transportado paralelamente, estando \mathbf{r} na direção radial à esfera. A velocidade angular é assim expressa

$$\Omega_{\parallel} = \mathbf{r} \wedge \dot{\mathbf{r}} = V\mathbf{w} \quad (10)$$

Vamos inicialmente mostrar que

$$\frac{\partial U}{\partial t} = (-iV\mathbf{w} \cdot \boldsymbol{\sigma}) U(t) \quad (11)$$

satisfaz a equação (7).

Os elementos diagonais $\langle \pm | (|\dot{+}\rangle \langle +| + |\dot{-}\rangle \langle -|) | \pm \rangle$ são nulos, pois os autoestados são ortogonais e satisfazem a relação (4): $\langle \pm | \frac{\partial}{\partial t} | \pm \rangle = 0$. Os elementos diagonais $\langle \pm | \mathbf{w} \cdot \boldsymbol{\sigma} | \pm \rangle$ também se anulam, pois por construção \mathbf{w} é perpendicular a \mathbf{r} e os $|\pm\rangle$ são autofunções de $\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Obtemos os elementos fora da diagonal

$$\langle \pm | (|\dot{+}\rangle \langle +| + |\dot{-}\rangle \langle -|) | \mp \rangle = \langle \pm | \frac{\partial}{\partial t} | \mp \rangle \quad (12)$$

Usando as equações de autovalores para o operador $H(2)$, a saber,

$$\kappa \cdot \sigma | \pm \rangle = \pm \frac{1}{2} | \pm \rangle, \quad (13)$$

onde $|\kappa| = 1$ e derivando-as com respeito ao tempo, resulta

$$\dot{\kappa} \cdot \sigma | \mp \rangle + \kappa \cdot \sigma | \dot{\pm} \rangle = \mp \frac{1}{2} | \dot{\pm} \rangle \quad (14)$$

Agora efetuando o produto de $\langle \pm |$ com (14) e empregando as definições (9), obtemos

$$\sqrt{\langle \pm | \nu \cdot \sigma | \mp \rangle} + \langle \pm | \kappa \cdot \sigma | \dot{\pm} \rangle = \mp \frac{1}{2} \langle \pm | \dot{\pm} \rangle \quad (15)$$

Das equações de autovalores (13) resulta uma expressão para os elementos $\langle \pm | \kappa \cdot \sigma | \dot{\pm} \rangle$

$$\langle \pm | \kappa \cdot \sigma | \dot{\pm} \rangle = \pm \frac{1}{2} \langle \pm | \dot{\pm} \rangle \quad (16)$$

Comparando (16) com (15), resulta a seguinte relação

$$\sqrt{\langle \pm | \nu \cdot \sigma | \mp \rangle} = \mp \langle \pm | \dot{\pm} \rangle \quad (17)$$

Para determinar os produtos $\langle + | \dot{-} \rangle$ e $\langle - | \dot{+} \rangle$ vamos escolher eixos locais em que os vetores κ , ν e w estejam nas direções \mathbb{k} , i e j respectivamente. Concluimos que

$$\langle + | \dot{-} \rangle = -\frac{\sqrt{2}}{2} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\sqrt{2}}{2} \quad (18)$$

$$\langle + | -i\nu w \cdot \sigma | \dot{-} \rangle = -i\frac{\sqrt{2}}{2} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\sqrt{2}}{2} \quad (19)$$

$$\langle - | \dot{+} \rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad (20)$$

$$\langle - | -i\nu w \cdot \sigma | \dot{+} \rangle = -i\frac{\sqrt{2}}{2} (0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad (21)$$

Portanto, a igualdade entre os operadores $(|\dot{+}\rangle\langle +| + |\dot{-}\rangle\langle -|)$ e

$-i\nu w \cdot \sigma$ se verifica para todo elemento de matriz. A equação

(11) nos leva a uma expressão para o operador de evolução

$$U(t) = \hat{T} e^{-i \int_{-\infty}^t dt' \Omega_H(t') \cdot \sigma} \quad (22)$$

onde a frequência angular Ω é definida em (10).

Para visualizar o movimento do triedro sobre o espaço de parâmetros^(5a) consideremos o versor e_z é perpendicular a esfera em cada ponto. A medida que $R(t)$ varia, o triedro move-se ao longo da esfera com sua origem definida na mesma. A origem do triedro "representa" a direção de $R(t)$. Quando R retorna a configuração inicial, paralela ao eixo z externo, o vetor e_z do triedro não retorna paralelo a este. O triedro transportado ao longo de uma curva fechada C no espaço de parâmetros roda em relação a direção original de e_z (paralela a direção z externa) devido a curvatura da esfera. O ângulo α formado entre e_z e o eixo z externo, após a variação cíclica dos parâmetros é a integral da curvatura gausseana K da esfera sobre a região limitada pelo caminho C .

Na formulação de Aharonov e Anandan, um autoestado transportado ao longo de um laço no espaço de Hilbert projetivo, adquire uma fase geométrica, em adição à fase dinâmica. Essas fases são independentes de uma particular escolha do operador unitário $U(t)$ de evolução. A existência da fase de Berry reflete uma propriedade geométrica da evolução do sistema quântico, não sendo necessário a hipótese de evolução adiabática. É possível⁽⁴⁾, associar uma fase geométrica à evolução cíclica, não-trivial de um sistema quântico.

A condição (4): $\langle n(0) | U^\dagger(t) \frac{d}{dt} U(t) | n(0) \rangle = 0$ reflete o transporte paralelo do $U(t) | n(0) \rangle$ ao longo de um laço Γ (no espaço de Hilbert projetivo). No entanto, essa condição implica que a conexão de Berry é nula em cada ponto de Γ . A escolha de uma

conexão possibilita-nos um meio de transladar paralelamente estados ao longo de curvas. Vimos que ao transportarmos o triedro $\mathcal{R}, \mathcal{V}, \mathcal{W}$ ao longo de uma curva em S^2 , obtivemos um ângulo α proporcional a integral da curvatura gausseana da esfera. Este ângulo (não-nulo) é igual a fase geométrica.

Se a fase de Berry é invariante por transformações unitárias, então a escolha do operador de evolução $U(t)$ tal que o potencial de Berry não seja nulo, não altera esta fase. Em geral, a conexão de Berry será da forma: $g dg$ (para uma determinada escolha de Gauge).

REFERENCIAS

- [1] D.H. Kobe Preprint: IFT/P - 15/89 (1989)
- [2] M.V. Berry Proc.R.Soc. A392, 45 (1984)
- [3] Y. Aharonov and J. Anandan Phys.Rev.Lett. 58 (1987), 1493
- [4] J. Anandan Phys.Lett. A133 (1988)
- [5] K.H. Yang Ann.Phys. (N.Y.) 101, 62 (1976)
- [6] F. Wilczek and A. Zee Phys.Rev.Lett. 52, 2111 (1984)
- [7] J. Moody, A. Shapere and F.Wilczek
Phys.Rev.Lett. 56, 893 (1986)
- [8] J. Moody, A. Shapere and F. Wilkzek IASSNS - HEP - 89/13
- [9] M. Born and J.R. Oppenheimer Ann. d Physik 84, 457 (1927)
- [10] R.Y. Chiao and Y.S: Wu Phys.Rev.Lett. 57, 933 (1986)
- [11] A. Tomita and R.Y. Chiao Phys.Rev.Lett. 57, 937(1986)
- [12] M.V. Berry J.Mod.Opt. 34, 1401 (1987)
- [13] S. Pancharatnam Proc.Ind.Acad.Sci. A44, 247 (1956)
- [14] D. Rohrlich, G. Giavarini, E. Gozzi and W.D. Thacker
Phys.Lett A 138, 235(1989)
Phys.Rev. D 39, 3007 (1989)
- [15] Ph. de Sousa Gerbert ann.Phys. (N.Y.) 189, 155 (1989)
- [16] P.A.M. Dirac Proc. Royal Soc. (london) A 133, 60 (1931)
- [17] T.T. Wu and C.N. Yang, Phys.Rev. D12, 3845 (1975)
- [18] B. Simon Phys.Rev.Lett. 51, 2167 (1983)
- [19] C.A. Mead and D.G. Truhlar J.Cham.Phys. 70, 2284 (1979)
- [20] J. Segert J. Math.Phys. 28, 2102 (1987)
- [21] L. Vinet Phys.Rev.D 37, 2369(1988)

- [22] R. Jackiw Int. J. Mod. Phys. A 3, 285(1988)
- [23] D. N. Page Phys. Rev. A36, 3479(1987)
- [24] J. H. Hannay J. Phys. A18, 221 (1985)
- [25] M. V. Berry J. Phys. A18, 15 (1985)
- [26] F. D. M. Haldane Phys. Rev. Lett. 59, 1788 (1987)
- [27] J. Segert Phys. Rev. A 36, 10 (1987)
- [28] S. Ramaseshan and R. Nityananda Current Science,
India, 55, 1225 (1986)
- [29] T. Bitter and D. Dubbers Phys. Rev. Lett. 59, 251 (1987)
- [30] R. Tycko Phys. Rev. 58, 2281 (1987)
- [31] J. E. Avron, R. Seiler and B. Simon
Phys. Rev. Lett. 51, 51 (1983)
- [32] D. Suter, K. T. Mueller and A. Pines
Phys. Rev. Lett. 60, 1218 (1988)
- [33] Kobe, Aguilera Navarro, Kurcbart and Zimmerman
Preprint: IFT/P - 24/89 (1989)
- [34] D. Rohrlich, G. Giavarini, E. Gozzi and W. D. Thacker,
Phys. A 22, 3513 (1989)
- [35] L. I. Schiff, Quantum Mechanics (McGraw - Hill, N. Y. 1968)
- [36] E. T. Whittaker, A treatise on the analytical dynamics of par-
ticles and rigid bodies, fourth edition, Dover, N. Y. (1944)
- [37] A. Messiah,
Quantum Mechanics vol. 2 (Amsterdam: North-Holland) 1981
- [38] Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. 115 (1959) 485
- [39] D. H. Kobe, Ann. Phys. 123, 381 (1979)
M. H. Peskin, Phys. Rep. 80, 375 (1981)

- [40] H. A. Bethe and R. Jackiw, Intermediate Quantum Mechanics, second edition, W. A. Benjamin, 1968
- [41] M. Born and E. Wolf, Principles of Optics. (Pergamon) 1959
- [42] D. H. Kobe, J. Phys. A. Math. Gen. 15, 787 (1982)
- [43] S. M. Barnett, D. Ellinas and M. A. Dupertuis, J. Mod. Opt. 35, 565 (1988)
- [44] Salomon S. Mizrahi Phys. Lett. A 138, 465 (1989)
- [45] Donald Kobe, E. C. T. Wen and K. H. Yang Phys. Rev. D 26, 1927 (1982)
- [46] K. H. Yang Phys. Lett. 64A, 276 (1977)
- [47] C. C. Tannoudji, F. Diu, F. Laboe Mecanique Quantique - Tome 1, Hermann, 1973
- [48] Ruben Aldrovandi - The Language of forms and bundles (Preliminary) 1986
Luiz A. Ferreira - Lectures Notes on Lie Algebras and Lie Groups: An Introductory Course.
- [49] R. S. Millman and G. D. Parker Elements of differential geometry, Prentice-Hall 1976
- [50] M. P. do Carmo: Differential geometry of curves and surfaces, Prentice Hall, E. C., 1976
- [51] W. Klingenberg - A course in Differential geometry Springer - Verlag, N. Y. 1978
- [52] F. W. Warner - Foundations of Differentiable Manifolds and Lie Groups - Springer - Verlag N. Y. 1983

- [53] S. Kobayashi • K.Nomizu: Foundations of differential geometry,
Wiley, N.Y. 1963
- [54] R. Abraham and J.E. Marsden: Foundation of mechanics,
second edition, Benjamin-Cummings, R.M. 1982
- [55] N.J. Hicks: Notes on differential geometry,
Van Nostrand, Princeton, N.J. 1965
- [56] D. Bleecker - Gauge Theory and Variational Principles
Addison-Wesley Publishing Company 1981
- [57] M. Berry Proc. Royal Soc. A 14, 31(1987)
- [58] J. Anandan and L. Stodolsky Phys.Rev.D35, 2597 (1987)
- [59] J. Samuel and R. Bhandari
Phys.Rev.Lett. 60, 2339 (1988).

