



**INSTITUTO DE FÍSICA**  
Universidade Federal Fluminense

# Fases Geométricas por Integrais de Trajetória

por

Marcelo da Cunha Arcoverde Alves

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Física.

**Orientador:**

**Prof. Dra. Maria Teresa Climaco dos Santos Thomaz**

Niterói - R.J.

2007

Dedico este esforço  
àqueles de quem  
herdei a teimosia e  
a persistência: meus  
pais.

## Agradecimentos

Numa época de um quase domínio pleno do *american way*, onde os valores e ideais parecem ser marginais excêntricos e onde o imediatismo nos conduz à uma ânsia contínua por superar um vazio que nos é imposto, tenho muito a agradecer o exemplo de todos aqueles que cultivaram e cultivam o conhecimento, uma aventura de valor inestimável.

Agradeço aos amigos e aos colegas, aos que incentivaram, apoiaram e aos que compartilharam os momentos difíceis, de lutas e de superação. Em especial agradeço aos amigos Eliel Eleutério Farias e Luciana Antunes Rios que, digamos, são de certa maneira responsáveis (ou diria irresponsáveis) pelo passo dado em mais esta etapa acadêmica. Quando eu tentava avaliar e ponderar o caminho a seguir eles deram um empurrãozinho que modificou as condições iniciais do sistema! Obrigado.

Muito tenho a agradecer à minha companheira de todas as jornadas, Keity Corbani Ferraz - mais uma vez, obrigado.

São comuns em qualquer empreendimento os momentos de reflexão e de questionamento. Nestes instantes surge a pergunta mais freqüente que põe em dúvida nossa opção pelo caminho seguido. Pois só agora, ao fazer estes agradecimentos, dou-me conta de que em momento algum desta empreitada essa pergunta se fez presente. Isto se deve, sem dúvida, à orientação sólida, à condução lúcida, à dedicação e ao exemplo profissional que recebi neste processo de aprendizado e formação. À Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Maria Teresa Climaco dos Santos Thomaz, meu agradecimento e reconhecimento sinceros.

## **Resumo**

Estudamos a evolução temporal de um sistema quântico, sob o regime adiabático, através da formulação de integrais de trajetória. Reobtemos as fases de Berry para sistemas de espectros de energia não-degenerado e degenerado, recuperando os resultados conhecidos na literatura, inclusive verificamos o comportamento das fases por uma mudança de base de autoestados instantâneos da hamiltoniana. Apresentamos também uma demonstração do Teorema Adiabático[1] usando uma notação atual. Temos um resumo comparativo das representações de Schrödinger e de Heisenberg para uma hamiltoniana que varia no tempo e descrevemos como aplicar o Teorema Adiabático a um operador qualquer na representação de Heisenberg sob o regime adiabático.

## **Abstract**

We study the time evolution of a quantum system under the adiabatic condition using the path integral formulation. We reobtain Berry's phase for systems with non-degenerate and degenerate energy spectra, recovering the well-known results on the literature, and we verify the behavior of the phases under a change of basis of the energy instantaneous eigenstates. We also present a simple derivation of the Adiabatic Theorem[1] using the current notation. We have a comparative summary between the Schrödinger's and the Heisenberg's pictures when the quantum system is driven by a time-dependent hamiltonian and we show how to apply the Adiabatic Theorem to any operator in the Heisenberg's picture that evolves under adiabatic conditions.

# Índice

1. Introdução .....	1
2. Fases Geométricas na Mecânica Quântica via Forma Diferencial .....	5
3. Fases de Berry Via Integral de Trajetória .....	14
3.1 Hamiltonianas de Espectro Não-degenerado .....	19
3.2 Hamiltonianas de Espectro Degenerado .....	24
4. Conclusão .....	31
Apêndice	
A. Teorema Adiabático .....	33
B. Representações Unitárias e a Evolução Adiabática .....	38
Referências Bibliográficas .....	45

# Capítulo 1

## Introdução

Para descrevermos as leis que governam os fenômenos físicos, dispomos de duas ferramentas matemáticas fundamentais que nos dão informações locais e globais sobre o sistema em estudo: a formulação diferencial e a formulação integral. Na Mecânica Quântica, a formulação diferencial é dada pela equação de Schrödinger, a qual descreve a evolução dinâmica de um sistema que é representado por um vetor pertencente ao espaço de Hilbert, o vetor de estado. A formulação integral, por outro lado, é dada pela integral de trajetória, onde o sistema é descrito pela evolução de uma função de onda a partir de um instante considerado inicial até um instante posterior.

As equações da Mecânica Quântica (M.Q.) que dão a dinâmica do sistema físico são equações lineares e, portanto, a soma de soluções linearmente independentes é também uma solução destas equações. Com isso surge o fenômeno de interferência, que está diretamente relacionado à presença de fases. Fases estas que podem ter conteúdo físico, como as fases dinâmicas que são indissociáveis do sistema físico, e as fases que podem ter apenas natureza matemática, estando associadas às bases completas nas quais representamos o vetor de estado que des-

creve o sistema físico. As fases matemáticas podem ser canceladas ou acrescentadas, por conveniência, através de uma mudança de base. É de se ressaltar, portanto, a importância que tem o estudo das fases na M.Q.

Fases não-dinâmicas já eram conhecidas desde o início da M.Q.[1], contudo, foi somente em 1984 que M.V. Berry derivou as fases geométricas [2]. Ele obteve as fases estudando a evolução adiabática de um sistema quântico em interação com o meio e governado por uma hamiltoniana de espectro não-degenerado, através da equação de Schrödinger, ou seja, na formulação diferencial. Estas fases são conhecidas na literatura como fases de Berry. Dentro da mesma formulação diferencial, Wilczek e Zee [3] estudaram um sistema submetido a uma hamiltoniana que varia no tempo adiabaticamente e de espectro degenerado obtendo uma estrutura não-abeliana clássica para as fases geométricas. A formulação integral foi então utilizada por Kuratsuji e Iida [4] que, através das integrais de trajetória, descreveram dois sistemas quânticos com escalas de tempo muito diferentes entre si, analisando o comportamento da hamiltoniana efetiva do sistema mais lento com a aquisição das fases geométricas durante sua evolução. Em 1989 M.V. Berry[5] mostrou como obter as fases geométricas da Ref.[2] por integrais de trajetória para um sistema governado por uma hamiltoniana de espectro não-degenerado em interação com a vizinhança através de funções cíclicas que variam lentamente no tempo.

Neste trabalho temos por objetivo estudar as fases de Berry dentro do formalismo das integrais de trajetória, tanto para sistemas governados por hamiltonianas de espectro não-degenerado quanto para hamiltonianas de espectro degenerado. Estudamos sistemas que evoluem adiabaticamente no tempo e interagem com o meio de forma fenomenológica, através de campos clássicos. Confirmamos os resultados já obtidos [2, 3, 5] e estendemos a aplicação deste formalismo ao

caso degenerado, pormenorizando, inclusive, os procedimentos de mudança de base via integral de trajetória.

Ao utilizarmos o formalismo das integrais de trajetória, podemos calcular a evolução temporal das amplitudes de probabilidade de um sistema quântico trabalhando apenas com funções, o que, comparativamente à formulação diferencial, é mais confortável, uma vez que não se faz uso de operadores. Fica evidente também, nesse formalismo, a diferença introduzida pela Mecânica Quântica em relação à Mecânica Clássica, quando devemos levar em conta todas as trajetórias possíveis para o cálculo da evolução da amplitude de probabilidade entre dois instantes quaisquer, dadas as condições de contorno. A ausência de uma única trajetória no espaço das coordenadas surge como consequência da não comutatividade dos operadores posição e momento. As trajetórias que contribuem efetivamente para o resultado são aquelas não descartadas pela aplicação do Teorema Adiabático.

Para desenvolvermos nosso estudo torna-se conveniente uma primeira abordagem às fases geométricas. Desta forma, no capítulo 2, apresentamos as fases de Berry no formalismo de equação diferencial, o mesmo utilizado por M. V. Berry para a obtenção destas fases em hamiltonianas cíclicas [2]. Tratamos o caso particular mais simples de um sistema quântico governado por uma hamiltoniana de espectro não-degenerado em interação fenomenológica com o meio e evoluindo adiabaticamente no tempo. Uma vez obtidas as fases geométricas, verificamos a sua independência com a base de autoestados da hamiltoniana escolhida realizando uma mudança de base.

Dividimos o capítulo 3 em duas seções. Na primeira obtemos mais uma vez as fases geométricas para um sistema com as mesmas condições dadas no capítulo 2, porém agora utilizamos o formalismo das integrais de trajetória. Efetuamos uma

---

mudança de base e reobtemos o resultado do cap. 2 via integral de trajetória. Na segunda seção desenvolvemos a parte principal desta tese onde utilizamos o formalismo de integrais de trajetória para descrever um sistema governado por uma hamiltoniana cíclica e de espectro degenerado interagindo com o meio através de campos clássicos. Supomos a aproximação da evolução adiabática no tempo e aplicamos o Teorema Adiabático na integral de trajetória. Testamos a consistência das fases através de uma mudança de base e encontramos a estrutura não-abeliana em conformidade com o resultado obtido na Ref.[3], agora, porém, na formulação integral.

Acrescentamos dois breves apêndices. No apêndice A apresentamos uma versão do Teorema Adiabático[1] escrito segundo a notação de Dirac (bras e kets). Todo o desenvolvimento explorado nesta tese está baseado neste teorema. No apêndice B mostramos a vantagem de se trabalhar com a função de onda em representações unitárias. Discutimos, em especial, uma transformação da representação de Schrödinger para a de Heisenberg e como aplicar o Teorema Adiabático a fim de obter a expressão de qualquer operador nesta última representação.

## Capítulo 2

# Fases Geométricas na Mecânica Quântica via Forma Diferencial

Neste capítulo temos por objetivo apresentar as fases geométricas no formalismo de equação diferencial, o mesmo utilizado por M. V. Berry para a obtenção destas fases em hamiltonianas cíclicas [2]. Estaremos tratando o caso particular mais simples de um sistema *quântico* com um período característico  $T_r$  e governado pela hamiltoniana  $\mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t))$ , de espectro *não-degenerado*. A interação efetiva entre este sistema *quântico* e o meio externo é descrito por um conjunto de campos *clássicos*  $\vec{\mathbf{R}}(t)$ , tal que a hamiltoniana varia indireta e lentamente no tempo, de forma cíclica, com um período  $T$ . A escala de tempo dos fenômenos quânticos é muito menor do que a da variação da hamiltoniana, ou seja,  $T_r \ll T$ . Utilizaremos a *representação de Schrödinger* para descrever a evolução do sistema quântico. Partiremos de um vetor de estado conhecido, acompanharemos a sua evolução *adiabática* no tempo através da equação de Schrödinger, projetando-o sobre uma base de autoestados da hamiltoniana do sistema em cada instante  $t$ .

Seja, então, um sistema subdividido em dois sub-sistemas, sendo que aquele

que temos de estudar em detalhes é governado pela hamiltoniana quântica  $\mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t))$ , de espectro não-degenerado e com um período característico  $T$ . O conjunto de campos clássicos  $\vec{\mathbf{R}}(t)$  descreve de forma fenomenológica a interação efetiva entre o sistema que desejamos observar e a sua vizinhança, o outro sub-sistema. Os fenômenos, como transição entre níveis de energia, do sub-sistema governado pela hamiltoniana têm o período característico  $T_r$ , sendo que estamos tratando processos adiabáticos em que temos  $T_r \ll T$  [1]. A dinâmica do nosso sistema quântico é dada pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle_s = \mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\psi(t)\rangle_s, \quad (2.1)$$

onde em cada instante os autoestados de energia são:

$$\mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s = E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s. \quad (2.2)$$

A condição de ortonormalização satisfeita por esses estados é

$${}_s\langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle_s = \delta_{nm}, \quad (2.3)$$

sendo que o conjunto  $\{ |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s \}$  forma uma base completa em cada instante  $t$ :

$$\sum_n |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s {}_s\langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) | = \mathbf{1}. \quad (2.4)$$

Lembrando que  $\mathbf{1}$ , no l.d. da eq.(2.4), é o operador identidade.

Projetando o vetor de estado da equação que descreve o sistema no instante  $t$  na base dos autoestados de  $\mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t))$  neste instante, obtemos:

$$|\psi(t)\rangle_s = \sum_n c_n(t) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s. \quad (2.5)$$

Reescrevemos os coeficientes  $c_n(t)$  de forma mais conveniente, de maneira que a eq.(2.5) recaia na decomposição usual quando a hamiltoniana é independente do tempo, ou seja,

$$|\psi(t)\rangle_s = \sum_n a_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(\vec{\mathbf{R}}(t'))} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s. \quad (2.6)$$

Substituindo a eq.(2.6) na eq.(2.1), obtemos as equações que governam a dinâmica dos coeficientes  $a_n(t)$ ,

$$\frac{d}{dt}a_m(t) = - \sum_n a_n(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (E_m \vec{\mathbf{R}}(t') - E_n \vec{\mathbf{R}}(t'))} {}_s \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\frac{d}{dt} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle)_s. \quad (2.7)$$

O l.d. da eq.(2.7) inclui o termo  $n = m$ , onde também vemos a presença de termos de troca entre autoestados da hamiltoniana quando  $m \neq n$ , ou seja,  ${}_s \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\frac{d}{dt} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle)_s$ .

As variações no tempo dos autoestados de energia estão associadas à mudança adiabática da hamiltoniana, que é governada pelo conjunto de campos clássicos  $\vec{\mathbf{R}}(t)$ . Desejamos reescrever o coeficiente  ${}_s \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\frac{d}{dt} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle)_s$  que aparece no l.d. da eq.(2.7) em termos da variação da hamiltoniana. Para obter essa relação calculamos a derivada em relação ao tempo da eq.(2.2),

$$\begin{aligned} & (\frac{d}{dt} \mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t))) | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle_s + \mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t)) (\frac{d}{dt} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle)_s = \\ & = (\frac{d}{dt} E_n(\vec{\mathbf{R}}(t))) | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle_s + E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) (\frac{d}{dt} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle)_s. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Projetando os dois lados da eq.(2.8) no bra  ${}_s \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) |$ , obtemos:

$$\begin{aligned} & {}_s \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\frac{d}{dt} \mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t))) | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle_s = \\ & = \delta_{m,n} \frac{d}{dt} E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) + (E_n(t) - E_m(t)) {}_s \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\frac{d}{dt} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle)_s. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Para  $n = m$  o termo  ${}_s \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\frac{d}{dt} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle)_s$  não aparece no l.d. da eq.(2.9).

Quando  $m \neq n$ , chegamos à expressão:

$${}_s \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\frac{d}{dt} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle)_s = \frac{{}_s \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\frac{d}{dt} \mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t)) | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle)_s}{E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) - E_m(\vec{\mathbf{R}}(t))}. \quad (2.10)$$

Este resultado nos permite reescrever a eq.(2.7) da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}a_m(t) = & -a_m(t) {}_s\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\frac{d}{dt} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle_s) - \\ & - \sum_{\substack{n \\ n \neq m}} a_n(t) \frac{{}_s\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\frac{d}{dt} \mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t)) | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle_s)}{E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) - E_m(\vec{\mathbf{R}}(t))} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (E_m \vec{\mathbf{R}}(t') - E_n \vec{\mathbf{R}}(t'))}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Pelo Teorema Adiabático (veja o Apêndice A), os termos do somatório ( $n \neq m$ ) podem ser desprezados quando  $T \rightarrow \infty$  devido à presença da fase, reduzindo a eq.(2.11) a:

$$\frac{d}{dt}a_m(t) = -a_m(t) {}_s\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\frac{d}{dt} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle_s). \quad (2.12)$$

A solução geral desta equação é:

$$a_m(t) = a_m(0) e^{-\int_0^t dt' {}_s\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t') | (\frac{d}{dt'} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t') \rangle_s)}. \quad (2.13)$$

No instante inicial,  $t = 0$ , o vetor de estado que descreve o sistema quântico é escrito na base dos autoestados de energia nesse instante como:

$$|\psi(0)\rangle_s = \sum_n a_n(0) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(0)\rangle_s. \quad (2.14)$$

Por simplicidade, consideraremos o sistema inicialmente num autoestado de energia, ou seja,  $|\psi(0)\rangle_s = |\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(0)\rangle_s$ , de modo que, pela condição de ortonormalização, temos  $a_n(0) = \delta_{n,m}$ .

Assim, temos para um instante qualquer  $t$ :

$$|\psi(t)\rangle_s = a_m(0) e^{-\int_0^t dt' {}_s\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t') | (\frac{d}{dt'} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t') \rangle_s)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_m(\vec{\mathbf{R}}(t'))} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle_s. \quad (2.15)$$

Para verificarmos a natureza das fases  ${}_s\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\frac{d}{dt} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle_s)$ , calculamos a sua derivada temporal levando em conta a condição de norma unitária para os autoestados de energia num instante  $t$  qualquer:

$$\frac{d}{dt}({}_s\langle\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s) = 0, \quad (2.16)$$

ou seja,

$$\left(\frac{d}{dt}{}_s\langle\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s = -{}_s\langle\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)|\left(\frac{d}{dt}|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s\right).\right. \quad (2.17)$$

Observando que:

$$\left(\frac{d}{dt}{}_s\langle\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s = ({}_s\langle\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)|\left(\frac{d}{dt}|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s\right))^*, \right. \quad (2.18)$$

verificamos deste modo que o integrando da exponencial da eq.(2.15) é um número imaginário puro.

Definimos a fase  $\gamma_m(t)$ ,

$$\gamma_m(t) \equiv i \int_0^t dt' {}_s\langle\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t')|\left(\frac{d|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t')\rangle_s}{dt'}\right), \quad (2.19)$$

onde, pelas eqs.(2.17) e (2.18)  $\gamma_m(t)$  é uma função real. Usando esta fase, re-escrevemos o vetor de estado para  $t > 0$  na forma:

$$|\psi(t)\rangle_s = a_m(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_m(\vec{\mathbf{R}}(t'))} e^{i\gamma_m(t)} |\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s. \quad (2.20)$$

Como a dependência no tempo dos estados  $|\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s$  é através dos campos clássicos, o integrando da fase  $\gamma_m(t)$ , na eq.(2.20), pode ser expresso como:

$$dt {}_s\langle\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)|\left(\frac{d|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s}{dt}\right) = d\vec{\mathbf{R}}(t) \cdot {}_s\langle\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)|(\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s), \quad (2.21)$$

e portanto,

$$\gamma_m(C) = i \int_C d\vec{\mathbf{R}} \cdot {}_s\langle\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}|(\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}\rangle_s), \quad (2.22)$$

sendo  $C$  o caminho percorrido pelos campos  $\vec{\mathbf{R}}(t)$ , desde o instante 0 até o instante  $t$ . Para o caso em que  $\vec{\mathbf{R}}(t)$  é um vetor tridimensional, temos:

$$\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} = \left[ \hat{i} \frac{\partial}{\partial X} + \hat{j} \frac{\partial}{\partial Y} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial Z} \right], \quad (2.23)$$

onde estamos usando a convenção:  $\vec{\mathbf{R}}(t) = X(t)\hat{i} + Y(t)\hat{j} + Z(t)\hat{k}$ .

No caso particular em que  $t = T$ , onde  $\vec{\mathbf{R}}(0) = \vec{\mathbf{R}}(T)$ , a fase (2.22) passa a ser:

$$\gamma_{m(C)} = i \oint_{\mathcal{C}} d\vec{\mathbf{R}} \cdot {}_s\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} | \vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} \rangle_s. \quad (2.24)$$

Como temos um circuito fechado no espaço de  $\vec{\mathbf{R}}(t)$ , usamos o Teorema de Stokes para reescrever a eq.(2.24). Para simplificar a notação, definimos:

$$\vec{\mathbf{A}}_m(\vec{\mathbf{R}}) \equiv i {}_s\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} | (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} \rangle_s). \quad (2.25)$$

Deste modo temos, finalmente,

$$\gamma_m(C) = \oint_{\mathcal{C}} d\vec{\mathbf{R}} \cdot \vec{\mathbf{A}}_m(\vec{\mathbf{R}}) = \int_{\mathcal{S}} ds \hat{\mathbf{n}}(\vec{\mathbf{R}}) \cdot (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \times \vec{\mathbf{A}}_m(\vec{\mathbf{R}})), \quad (2.26)$$

onde  $\mathcal{S}$  é qualquer superfície aberta delimitada pelo caminho fechado  $\mathcal{C}$  e  $\hat{\mathbf{n}}(\vec{\mathbf{R}})$  é o vetor unitário perpendicular à superfície  $\mathcal{S}$  e cujo o sentido é dado pela regra da mão direita.

Esta é a fase de Berry, a qual, como podemos constatar, não depende do tempo. Substituindo este resultado na eq.(2.20) também podemos verificar que cada autoestado da hamiltoniana tem sua própria fase geométrica.

Os autoestados de energia, mesmo com espectro não-degenerado, não são únicos. Para verificarmos como as fases  $\gamma_m(t)$  se modificam com uma mudança de base, escolhemos um novo conjunto de autoestados da hamiltoniana  $\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t))$ , tal que:

$$|\phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s = e^{i\alpha_n(t)} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s, \quad (2.27)$$

sendo que  $\alpha_n(t)$  é uma função real com dependência no tempo através dos campos clássicos,  $\vec{\mathbf{R}}(t)$ . A base  $\{|\phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s\}$  é também completa e ortonormal em cada instante  $t$ ,

$${}_s\langle \phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) | \phi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle_s = \delta_{n,m} \quad (2.28a)$$

e

$$\sum_n |\phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s \langle \phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)| = \mathbf{1}. \quad (2.28b)$$

O vetor de estado inicial vem dado por:

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle_s &= c_m(0) |\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(0)\rangle_s \\ &= d_m(0) |\phi_m; \vec{\mathbf{R}}(0)\rangle_s. \end{aligned} \quad (2.29)$$

com  $d_m(0) = e^{-i\alpha_m(0)}c_m(0)$ . Procedendo de forma análoga ao que fizemos da eq.(2.6) até a eq.(2.15), para um instante  $t$  qualquer, temos:

$$|\psi(t)\rangle_s = d_m(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_m(t')} e^{\int_0^t dt' {}_s\langle \phi_m; \vec{\mathbf{R}}(t') | (\frac{d}{dt'} |\phi_m; \vec{\mathbf{R}}(t')\rangle_s)} |\phi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s, \quad (2.30)$$

onde a fase devido à evolução adiabática do sistema quântico, nesta nova base, aparece no integrando da segunda exponencial, do l.d. da equação anterior.

Para compararmos as fases da dinâmica adiabática obtidas nas duas bases de autoestados da hamiltoniana no instante  $t$ , isolamos a segunda fase do l.d. da eq.(2.30) e efetuamos a derivada em  $t$ ,

$${}_s\langle \phi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\frac{d}{dt} |\phi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s) = i \frac{d}{dt} \alpha_m(t) + {}_s\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\frac{d}{dt} |\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s). \quad (2.31)$$

Observamos que o segundo termo do l.d. da equação anterior é a fase  $\gamma_m(t)$ , de forma que reescrevemos a eq.(2.30) como

$$|\psi(t)\rangle_s = d_m(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_m(t')} e^{i\gamma_m(t)} e^{-i\int_0^t dt' \frac{d\alpha_m(t')}{dt'}} |\phi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s. \quad (2.32)$$

Agrupando as duas últimas exponenciais da eq.(2.32) e realizando a integração da diferencial exata, passamos a ter:

$$|\psi(t)\rangle_s = d_m(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_m(t')} e^{i(-\alpha_m(t)+\alpha_m(0)+\gamma_m(t))} |\phi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s. \quad (2.33)$$

Com uma escolha apropriada,  $\alpha_m(t) = \alpha_m(0) + \gamma_m(t)$ , podemos eliminar as fases geométricas na nova base de autestados instantâneos de energia.

No entanto, devemos lembrar que a dependência temporal de  $\alpha_m(t)$  vem através dos campos clássicos,  $\alpha_m(t) = \alpha_m(\vec{\mathbf{R}}(t))$ , e portanto,

$$\frac{d}{dt}\alpha_m(t) = \vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}(\alpha_m(\vec{\mathbf{R}}(t))) \cdot \frac{d\vec{\mathbf{R}}(t)}{dt}. \quad (2.34)$$

Substituindo a expressão (2.34) e o valor de  $\gamma_m(t)$ , dado pela eq.(2.22), em (2.32), temos:

$$|\psi(t)\rangle_s = d_m(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_m(t')} e^{-i\int_{\vec{\mathbf{R}}(0)}^{\vec{\mathbf{R}}(t)} [\vec{\nabla}\alpha_m(\vec{\mathbf{R}}(t)) - i_s\langle\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}|\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}\rangle_s] \cdot d\vec{\mathbf{R}}(t)} |\phi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s. \quad (2.35)$$

Lembrando que definimos o vetor  $\vec{\mathbf{A}}_m(\vec{\mathbf{R}})$  pela eq.(2.25), então definindo agora o novo vetor  $\vec{\mathbf{A}}'_m(\vec{\mathbf{R}})$ , que aparece na fase da nova base de autoestados de  $\mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t))$ ,

$$\vec{\mathbf{A}}'_m(\vec{\mathbf{R}}) = \vec{\mathbf{A}}_m(\vec{\mathbf{R}}) + \vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}(\alpha_m(\vec{\mathbf{R}}(t))), \quad (2.36)$$

verificamos que os vetores  $\vec{\mathbf{A}}_m(\vec{\mathbf{R}})$  se transformam como um campo de calibre clássico ao realizarmos uma mudança de base.

No caso particular de uma hamiltoniana cíclica temos  $\mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(0)) = \mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(T))$ , uma vez que  $\vec{\mathbf{R}}(0) = \vec{\mathbf{R}}(T)$ . Neste instante em especial temos também  $\alpha_m(0) = \alpha_m(T)$ , de modo que a fase  $\gamma_m(C)$  é preservada na eq.(2.33),

$$|\psi(T)\rangle_s = d_m(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^T dt' E_m(t')} e^{i\gamma_m(C)} |\phi_m; \vec{\mathbf{R}}(T)\rangle_s \quad (2.37)$$

para qualquer base de autoestados instantâneos de energia que utilizarmos.

Como neste caso a fase é uma integral no espaço dos campos clássicos, podemos aplicar o Teorema de Stokes na integral da fase de  $\vec{\mathbf{A}}'_m(\vec{\mathbf{R}})$ , obtendo o resultado:

$$\begin{aligned} & \oint_C [\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}\alpha_m(\vec{\mathbf{R}}) + i_s\langle\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}|\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}\rangle_s] \cdot d\vec{\mathbf{R}} = \\ & = \int_S \vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \times [\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}\alpha_m(\vec{\mathbf{R}}(t)) + i_s\langle\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}|\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}\rangle_s] \cdot \hat{\mathbf{n}} ds. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Uma vez que o rotacional de um gradiente é nulo, vemos que no l.d. da equação anterior apenas o termo correspondente à fase  $\gamma_m(C)$  permanece na integral, levando a eq.(2.35) de volta à eq.(2.20), que pode ser reescrita como:

$$|\psi(T)\rangle_s = a_m(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt E_m(t)} e^{i\gamma_m(C)} |\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(T)\rangle_s. \quad (2.39)$$

Assim, completado um período, desde que os campos externos descrevam uma trajetória *fechada*, a fase geométrica estará presente nas medidas que se fizer do sistema, não podendo ser anulada ou retirada por uma mudança de base.

# Capítulo 3

## Fases de Berry Via Integral de Trajetória

Este capítulo corresponde à proposta central desta tese, que é obter as fases geométricas a partir do formalismo de integrais de trajetória. Mostraremos como aplicar o Teorema Adiabático (apêndice A) na evolução no tempo de vetores de estado obtida via integral de trajetória. Note-se que as trajetórias aqui mencionadas são aquelas seguidas pelo sistema quântico, correspondentes à evolução no tempo dos autoestados instantâneos de energia, os quais formam bases apropriadas para descrever o espaço de Hilbert. Acrescente-se que obtemos a função de onda em qualquer instante  $t$ ,  $\psi(\vec{x}, t)$ , que possui a mesma expressão em qualquer representação unitária (veja o apêndice B).

A obtenção de fases geométricas para sistemas quânticos, com espectro de energia não-degenerado, via integral de trajetória foi apresentada por M. V. Berry em 1989 em um conjunto de seminários sobre evolução adiabática em sistemas não-holonômicos[5]. Nosso objetivo é reobter o resultado da Ref.[5] e estendê-lo para sistemas quânticos com espectro de energia degenerado.

Com as mesmas considerações feitas no Capítulo 2, estaremos tratando um sistema subdividido em duas partes, sendo uma delas descrita pelos campos clássicos  $\vec{\mathbf{R}}(t)$  que determinam a interação do sistema quântico de interesse com o meio externo. A outra sendo a parte do sistema que nos interessa observar e que é governada pela hamiltoniana  $\mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t))$ . As transições eletrônicas governadas por essa hamiltoniana ocorrem em períodos  $T_r$ , e ela (a hamiltoniana), varia indireta e lentamente no tempo através dos parâmetros *clássicos* com um período característico  $T$ , tal que  $T_r \ll T$ , de forma a ser válida a aplicação do Teorema Adiabático (veja o apêndice A).

Supondo que o sistema em estudo esteja inicialmente no estado dado pelo vetor  $|\psi(0)\rangle_s$ , na *representação de Schrödinger*, queremos obter a evolução dinâmica deste vetor do estado inicial quando transcorrido um intervalo de tempo *finito* qualquer, ou seja, queremos obter  $|\psi(t)\rangle_s$ .

Como visto no Capítulo 2, eq.(2.2), a hamiltoniana tem a cada instante uma equação de autovalor, que agora escrevemos de uma forma mais geral incluindo a possível degenerescência no seu espectro de energia:

$$\mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_n^{(l_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s = E_n^{(l_n)}(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_n^{(l_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s, \quad (3.1)$$

onde  $l_n = 1, 2, 3, \dots, D_n$ , sendo  $D_n$  o grau de degenerescência, *que não varia com o tempo*.

A condição de ortonormalização *no mesmo instante*  $t$  é dada por:

$${}_s \langle \varphi_n^{(l_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t) | \varphi_m^{(l_m)}; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle_s = \delta_{nm} \delta_{l_n l_m}, \quad (3.2)$$

sendo  $\{ |\varphi_n^{(l_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s \}$  uma base completa. A completeza da base nos garante, em cada instante  $t$ :

$$\sum_n \sum_{l_n=1}^{D_n} |\varphi_n^{(l_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s {}_s \langle \varphi_n^{(l_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t) | = \mathbf{1}, \quad (3.3)$$

onde  $\mathbf{1}$  é o operador identidade.

Desta forma podemos escrever o vetor de estado inicial em  $t = 0$  como:

$$|\psi(0)\rangle_s = \sum_M \sum_{l_M=1}^{D_M} c_M^{(l_M)}(0) |\varphi_M^{(l_M)}; \vec{\mathbf{R}}(0)\rangle_s. \quad (3.4)$$

Transcorrido um intervalo de tempo  $t$ , escrevemos o vetor de estado do sistema na forma:

$$|\psi(t)\rangle_s = \sum_n \sum_{l_n=1}^{D_n} c_n^{(l_n)}(t) |\varphi_n^{(l_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s. \quad (3.5)$$

Para descrevermos a evolução temporal do sistema a partir do estado inicial, dado pela eq.(3.4), até o estado dado pela eq.(3.5), devemos observar que o sistema sofrerá transformações sucessivas de uma base instantânea a outra, a cada instante  $t$ , onde os elementos dessas bases são autovetores da hamiltoniana em cada instante respectivo. É importante ressaltar que a hamiltoniana em instantes diferentes não comuta necessariamente consigo mesma, ou seja,  $[\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t_1)), \mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t_2))] \neq 0$ .

Dividimos então o intervalo de tempo, que vai do instante inicial  $t = 0$  até o instante posterior  $t$ , em  $N$  subintervalos infinitesimais  $\Delta t$ , tal que à medida que  $N \rightarrow \infty$ ,  $\Delta t \rightarrow 0$ .

Escrevendo a equação de Schrödinger, onde explicitamos a definição da derivada de um vetor de estado no tempo,

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_s \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{|\psi(t + \Delta t)\rangle_s - |\psi(t)\rangle_s}{\Delta t} = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\psi(t)\rangle_s, \quad (3.6)$$

obtemos em primeira ordem em  $\Delta t$  que:

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle_s = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t)) \cdot \Delta t} |\psi(t)\rangle_s, \quad (3.7)$$

uma vez que no limite de  $\Delta t \rightarrow 0$ , o operador  $e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t)) \cdot \Delta t}$  é reescrito até a 1ª ordem em  $\Delta t$  como:

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle_s \approx \left( \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t)) \cdot \Delta t \right) |\psi(t)\rangle_s + \mathcal{O}((\Delta t)^2), \quad (3.8)$$

onde  $\mathbf{1}$  é o operador identidade, e reobtemos a eq.(3.6), neste limite.

Deste modo, estando o sistema inicialmente no estado dado pela eq.(3.4) e o intervalo *finito*  $[0, t]$  dividido em  $N$  subintervalos iguais  $\Delta t$ , temos para um instante  $t$  qualquer, o vetor de estado do sistema em qualquer instante  $t$  é dado por:

$$|\psi(t)\rangle_s = \sum_n \sum_{l_n=1}^{D_n} c_n^{(l_n)}(0) e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}((N-1)\Delta t))} e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}((N-2)\Delta t))} \dots \\ \dots e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(\Delta t))} e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(0))} |\varphi_n^{(l_n)}; \vec{\mathbf{R}}(0)\rangle_s. \quad (3.9)$$

Identificando as exponenciais de cada intervalo  $\Delta t$  do l.d. da eq.(3.9) como o operador evolução,  $\mathbf{U}(t_n; t_{n-1}) \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t_{n-1}))\Delta t}$ , podemos verificar que a transformação que leva o sistema do estado inicial  $|\psi(0)\rangle_s$  até o estado  $|\psi(t)\rangle_s$  é uma transformação unitária pois, sendo

$$\mathbf{U}(t_N; t_0) = \mathbf{U}(t_N; t_{N-1})\mathbf{U}(t_{N-1}; t_{N-2})\dots\mathbf{U}(t_2; t_1)\mathbf{U}(t_1; t_0), \quad (3.10a)$$

este terá o operador conjugado dado por

$$\mathbf{U}^\dagger(t_N; t_0) = \mathbf{U}^\dagger(t_1; t_0)\mathbf{U}^\dagger(t_2; t_1)\dots\mathbf{U}^\dagger(t_{N-1}; t_{N-2})\mathbf{U}^\dagger(t_N; t_{N-1}), \quad (3.10b)$$

e, conseqüentemente:

$$\mathbf{U}(t_N; t_0)\mathbf{U}^\dagger(t_N; t_0) = \mathbf{1}. \quad (3.10c)$$

Portanto, para um instante  $t$  qualquer, a eq.(3.9) pode ser reescrita na forma:

$$|\psi(t)\rangle_s = \sum_M \sum_{l_M=1}^{D_M} c_M^{(l_M)}(0) \mathbf{U}(t_N; t_{N-1})\mathbf{U}(t_{N-1}; t_{N-2})\dots\mathbf{U}(t_1; t_0) |\varphi_M^{(l_M)}; \vec{\mathbf{R}}(0)\rangle_s. \quad (3.11)$$

Deste ponto em diante, a fim de tornar a leitura menos desconfortável, utilizamos a seguinte notação:

$$\mathbf{H}_s(t) \equiv \mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t)); \quad (3.12a)$$

$$|\varphi_n^{(l_n)}; t\rangle_s \equiv |\varphi_n^{(l_n)} \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s \quad (3.12b)$$

e

$$E_n^{(l_n)}(t) \equiv E_n^{(l_n)}(\vec{\mathbf{R}}(t)). \quad (3.12c)$$

Prosseguindo em nossos cálculos, projetamos o vetor de estado na base do espaço de coordenadas obtendo a função de onda,  $\psi(\vec{\mathbf{x}}, t) = {}_s(\vec{\mathbf{x}}|\psi(t)\rangle_s$ , reescrevendo a eq.(3.9) como:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{\mathbf{x}}, t) = \sum_M \sum_{l_M=1}^{D_M} c_M^{(l_M)}(0) {}_s(\vec{\mathbf{x}}| e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_s((N-1)\Delta t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_s((N-2)\Delta t)} \dots \\ \dots e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_s(\Delta t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_s(0)} |\varphi_M^{(l_M)}; 0\rangle_s. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Para trabalharmos no formalismo das integrais de trajetória, necessitamos eliminar os operadores e vetores presentes na eq.(3.13), a fim de termos apenas funções em nossas equações. Com este intuito introduzimos os operadores identidade  $\mathbf{1} = \sum_{n_i} \sum_{l_{n_i}=1}^{D_{n_i}} |\varphi_{n_i}^{(l_{n_i})}; t_i\rangle_s \langle \varphi_{n_i}^{(l_{n_i})}; t_i|$ , onde  $i = 1, 2, 3, \dots, N-2, N-1$ , formados pelos vetores da base correspondente a cada instante  $t$ :

$$\begin{aligned} \psi(\vec{\mathbf{x}}, t) = \sum_M \sum_{l_M=1}^{D_M} c_M^{(l_M)}(0) {}_s(\vec{\mathbf{x}}| e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_s((N-1)\Delta t)} \sum_{n_{N-1}} \sum_{l_{n_{N-1}}=1}^{D_{n_{N-1}}} |\varphi_{n_{N-1}}^{(l_{n_{N-1})}); t_{N-1}\rangle_s \times \\ \times {}_s \langle \varphi_{n_{N-1}}^{(l_{n_{N-1})}); t_{N-1}| e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_s((N-2)\Delta t)} \sum_{n_{N-2}} \sum_{l_{n_{N-2}}=1}^{D_{n_{N-2}}} |\varphi_{n_{N-2}}^{(l_{n_{N-2})}); t_{N-2}\rangle_s \langle \varphi_{n_{N-2}}^{(l_{n_{N-2})}); t_{N-2}| \dots \\ \dots e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_s(\Delta t)} \sum_{n_1} \sum_{l_{n_1}=1}^{D_{n_1}} |\varphi_{n_1}^{(l_{n_1})}; t_1\rangle_s \langle \varphi_{n_1}^{(l_{n_1})}; t_1| e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_s(0)} |\varphi_M^{(l_M)}; 0\rangle_s \end{aligned} \quad (3.14)$$

Respeitando a ordem em que aparecem as somatórias no l.d. da eq.(3.14), pode-

mos reescrever esta equação na forma:

$$\begin{aligned}
 \psi(\vec{x}, t) &= \\
 &= \sum_M \sum_{l_M=1}^{D_M} \sum_{n_1, \dots, n_{N-1}} \sum_{l_{n_1}, \dots, l_{n_{N-1}}=1}^{D_M} c_M^{(l_M)}(0) {}_s\langle \vec{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_s((N-1)\Delta t)} | \varphi_{n_{N-1}}^{(l_{n_{N-1})}}; t_{N-1} \rangle_s \times \\
 &\times {}_s\langle \varphi_{n_{N-1}}^{(l_{n_{N-1})}}; t_{N-1} | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_s((N-2)\Delta t)} | \varphi_{n_{N-2}}^{(l_{n_{N-2})}}; t_{N-2} \rangle_s {}_s\langle \varphi_{n_{N-2}}^{(l_{n_{N-2})}}; t_{N-2} | \dots \\
 &\dots e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_s(\Delta t)} | \varphi_{n_1}^{(l_{n_1})}; t_1 \rangle_s {}_s\langle \varphi_{n_1}^{(l_{n_1})}; t_1 | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_s(0)} | \varphi_M^{(l_M)}; 0 \rangle_s.
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

Os elementos de matriz  ${}_s\langle \varphi_{n_{i+1}}^{(l_{n_{i+1})}}; t_{n_{i+1}} | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_s(t_{n_i})} | \varphi_{n_i}^{(l_{n_i})}; t_i \rangle_s$  são a seguir analisados para os casos de espectro de energia não-degenerado e degenerado. É nesses elementos de matriz que devemos impor a condição de evolução adiabática, através do Teorema Adiabático, uma vez que pela eq.(3.7) temos

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}_s(t_{n_i}) \cdot \Delta t} | \varphi_{n_i}^{(l_{n_i})}; t_{n_i} \rangle_s = | \psi(t_{n_i} + \Delta t) \rangle_s, \tag{3.16}$$

onde o vetor de estado  $| \psi(t_{n_i} + \Delta t) \rangle_s$  corresponde à evolução de  $| \varphi_{n_i}^{(l_{n_i})}; t_{n_i} \rangle_s$  durante o intervalo  $\Delta t$ .

### 3.1 Hamiltonianas de Espectro Não-degenerado

Para uma hamiltoniana em que o espectro é não-degenerado,  $D_n = 1$ . Devemos então calcular:

$${}_s\langle \varphi_{n_{i+1}}; t_{n_{i+1}} | e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}_s(t_{n_i}) \cdot \Delta t} | \varphi_{n_i}; t_{n_i} \rangle_s. \tag{3.17}$$

Pela eq.(A.16), o Teorema Adiabático aplicado a sistemas com espectro de energia não-degenerado nos dá

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}_s(t_{n_i}) \cdot \Delta t} | \varphi_{n_i}; t_{n_i} \rangle_s \propto | \varphi_{n_i}; t_{n_i} + \Delta t \rangle_s \tag{3.18}$$

de forma que, usando a ortonormalidade dos autoestados da hamiltoniana no instante  $t_{n_i} + \Delta t$ , podemos afirmar que

$${}_s\langle \varphi_{n_{i+1}}; t_{n_{i+1}} | e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}_s(t_{n_i}) \cdot \Delta t} | \varphi_{n_i}; t_{n_{i+1}} \rangle_s \propto \delta_{n_i, n_{i+1}}. \tag{3.19}$$

Substituindo o resultado (3.19) na eq.(3.15), para o caso de espectro de energia não-degenerado, a função de onda no instante  $t$  passa a ser escrita como,

$$\begin{aligned} \psi(\vec{\mathbf{x}}, t) &= \sum_M c_M(0) \varphi_M(\vec{\mathbf{x}}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_M(t')} \times \\ &\times {}_s\langle \varphi_M; (N-1)\Delta t | \varphi_M; (N-2)\Delta t \rangle_s \times \cdots \times {}_s\langle \varphi_M; \Delta t | \varphi_M; 0 \rangle_s, \end{aligned} \quad (3.20)$$

onde  $\varphi_M(\vec{\mathbf{x}}, t) \equiv {}_s\langle \vec{\mathbf{x}} | \varphi_M; (N-1)\Delta t \rangle_s$ .

Usando a definição da derivada temporal para o vetor de estado temos,

$$\frac{d|\varphi_M; t\rangle}{dt} \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{|\varphi_M; t + \Delta t\rangle - |\varphi_M; t\rangle}{\Delta t}. \quad (3.21)$$

Desta forma,

$$\begin{aligned} {}_s\langle \varphi_M; (l+1)\Delta t | \varphi_M; l\Delta t \rangle_s &= 1 + \Delta t \left( \frac{d_s \langle \varphi_M; l\Delta t |}{dt} \right) |\varphi_M; l\Delta t \rangle_s \\ &= e^{\Delta t \left( \frac{d_s \langle \varphi_M; l\Delta t |}{dt} \right) |\varphi_M; l\Delta t \rangle_s} + \mathcal{O}((\Delta t)^2). \end{aligned} \quad (3.22)$$

Substituindo este resultado em cada intervalo  $\Delta t$  da eq.(3.20), chegamos à seguinte forma para a função de onda num instante qualquer:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{\mathbf{x}}, t) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{t_i=1}^{t_i=N-1} \Delta t E_M(t_i)} \sum_M c_M(0) \varphi_M(\vec{\mathbf{x}}; t) e^{-s \langle \varphi_M; \Delta t_{N-1} | \left( \frac{d}{dt} | \varphi_M; \Delta t_{N-2} \rangle_s \right) \cdot \Delta t} \times \\ &\times e^{-s \langle \varphi_M; \Delta t_{N-2} | \left( \frac{d}{dt} | \varphi_M; \Delta t_{N-3} \rangle_s \right) \cdot \Delta t} \dots e^{-s \langle \varphi_M; \Delta t_1 | \left( \frac{d}{dt} | \varphi_M; \Delta t_0 \rangle_s \right) \cdot \Delta t}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

No mesmo limite, a soma sobre todos os intervalos de tempo se transforma numa integral, de forma que temos a expressão final para a função de onda:

$$\psi(\vec{\mathbf{x}}, t) = \sum_M c_M(0) \varphi_M(\vec{\mathbf{x}}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_M(t')} e^{-\int_0^t dt' {}_s\langle \varphi_M; t' | \left( \frac{d}{dt'} | \varphi_M; t' \rangle_s \right)}. \quad (3.24)$$

Por este resultado observamos que, se o estado inicial for dado por um autoestado da hamiltoniana, a trajetória seguida pelo sistema será única e corresponderá à evolução deste autoestado de energia.

Lembrando que a dependência temporal do sistema é indireta, através dos campos clássicos  $\vec{\mathbf{R}}(t)$ , reescrevemos o integrando da segunda exponencial do l.d. da eq.(3.24) como:

$$dt {}_s \langle \varphi_M; t | \left( \frac{d}{dt} | \varphi_M; t \rangle_s \right) = d\vec{\mathbf{R}}(t) \cdot {}_s \langle \varphi_M; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_M; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle_s). \quad (3.25)$$

Definindo o vetor  $\vec{\mathbf{A}}_M(\vec{\mathbf{R}}(t))$  e a fase  $\gamma_M(t)$  como:

$$\vec{\mathbf{A}}_M(\vec{\mathbf{R}}) \equiv i {}_s \langle \varphi_M; \vec{\mathbf{R}} | (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_M; \vec{\mathbf{R}} \rangle_s) \quad (3.26a)$$

e

$$\gamma_M(C) \equiv \int_C d\vec{\mathbf{R}} \cdot \vec{\mathbf{A}}_M(\vec{\mathbf{R}}), \quad (3.26b)$$

onde  $C$  é a trajetória seguida pelos campos  $\vec{\mathbf{R}}(t)$ , desde o instante inicial até o instante  $t$ , a eq.(3.24) passa a ser escrita como:

$$\psi(\vec{\mathbf{x}}, t) = \sum_M c_M(0) \varphi_M(\vec{\mathbf{x}}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_M(t')} e^{i\gamma_M(C)}. \quad (3.27)$$

Como visto no capítulo anterior, para o caso em que  $\vec{\mathbf{R}}(t)$  é um vetor tridimensional,

$$\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} = \left[ \hat{i} \frac{\partial}{\partial X} + \hat{j} \frac{\partial}{\partial Y} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial Z} \right], \quad (3.28)$$

e com a convenção de que  $\vec{\mathbf{R}}(t) = X(t)\hat{i} + Y(t)\hat{j} + Z(t)\hat{k}$ , temos a situação particular  $t = T$ , em que  $\vec{\mathbf{R}}(0) = \vec{\mathbf{R}}(T)$ , a fase  $\gamma_M(t)$  como:

$$\gamma_M(C) = \oint_C d\vec{\mathbf{R}} \cdot \vec{\mathbf{A}}_M(\vec{\mathbf{R}}), \quad (3.29)$$

que é conhecida na literatura como a fase de Berry.

Podemos verificar que o resultado dado pela eq.(3.27) é o mesmo encontrado na eq.(2.39). Para tanto, basta supor o estado inicial em (3.4) como sendo um

único autoestado da hamiltoniana,  $|\psi(0)\rangle \equiv |\varphi_m; 0\rangle$ , e projetar a eq.(2.39) sobre os "bras" que representam o espaço das coordenadas,  $\{\vec{\mathbf{x}}\}$ .

Concluimos o capítulo anterior verificando o comportamento da fase geométrica ante uma mudança de base e concluimos, para o caso particular em que  $\vec{\mathbf{R}}(T) = \vec{\mathbf{R}}(0)$ , que a fase geométrica não depende da base de autovetores instantâneos da hamiltoniana. Seguindo os passos que nos levou a obter este importante resultado, verificamos agora, dentro do formalismo de integrais de trajetória, o comportamento da fase geométrica com uma mudança de base.

Seja o conjunto de autovetores da hamiltoniana,  $\{|\phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s\}$ , uma nova base completa e ortonormal a cada instante  $t$ , ou seja,

$$\mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s = E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s, \quad (3.30a)$$

$$\sum_n |\phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s \langle \phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)| = \mathbf{1} \quad (3.30b)$$

e

$${}_s\langle \phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) | \phi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s = \delta_{nm}. \quad (3.30c)$$

A cada instante, a nova base e a anterior estão assim relacionadas:

$$|\phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s = e^{i\alpha_n(t)} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s, \quad (3.31)$$

com  $\alpha_n(t) \in \mathbf{R}$ . O vetor de estado inicial  $|\psi(0)\rangle_s$  é decomposto nos elementos da nova base,

$$|\psi(0)\rangle_s = \sum_M d_M(0) |\phi_M; 0\rangle_s. \quad (3.32)$$

Repetindo os procedimentos que levaram da eq.(3.4) à eq.(3.24), observando que  $D_M = 1$ , obtemos para a função de onda, no instante  $t$ :

$$\psi(\vec{\mathbf{x}}, t) = \sum_M d_M(0) \phi_M(\vec{\mathbf{x}}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_M(t')} e^{-\int_0^t dt' {}_s\langle \phi_M; t' | (\frac{d|\phi_M; t'\rangle_s}{dt'})}. \quad (3.33)$$

Derivando a eq.(3.31) no tempo e projetando sobre o bra  ${}_s\langle\phi_M;t|$  obtemos:

$${}_s\langle\phi_M;t|\left(\frac{d|\phi_M;t\rangle_s}{dt}\right) = i\frac{d\alpha_M(t)}{dt} + {}_s\langle\varphi_M;t|\left(\frac{d|\varphi_M;t\rangle_s}{dt}\right). \quad (3.34)$$

Como a dependência temporal de  $\alpha_M(t)$  vem através de  $\vec{\mathbf{R}}(t)$ , temos:

$$\frac{d\alpha_M(t)}{dt} = \left(\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}\alpha_M(\vec{\mathbf{R}}(t))\right) \cdot \frac{d\vec{\mathbf{R}}}{dt}. \quad (3.35)$$

Com os resultados das eqs.(3.34) e (3.35), reescrevemos a função de onda,  $\psi(\vec{\mathbf{x}},t)$ , eq.(3.33), como:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{\mathbf{x}},t) &= \sum_M d_M(0) \phi_M(\vec{\mathbf{x}},t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_M(t')} \times \\ &\times e^{-i \int_{\vec{\mathbf{R}}(0)}^{\vec{\mathbf{R}}(t)} [(\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}\alpha_M(\vec{\mathbf{R}})) - i {}_s\langle\varphi_M;\vec{\mathbf{R}}(t)|(\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}|\varphi_M;\vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s)] \cdot d\vec{\mathbf{R}}}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Como visto no capítulo 2, podemos eliminar a fase geométrica da representação na nova base com uma escolha conveniente:

$$\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}\alpha_M(\vec{\mathbf{R}}) = i {}_s\langle\varphi_M;\vec{\mathbf{R}}(t)|\left(\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}\varphi_M;\vec{\mathbf{R}}(t)\right)_s. \quad (3.37)$$

Daqui definimos:

$$i {}_s\langle\varphi_M;\vec{\mathbf{R}}(t)|\left(\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}\varphi_M;\vec{\mathbf{R}}(t)\right)_s - \vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}\alpha_M(\vec{\mathbf{R}}) \equiv \vec{A}'_{\alpha}{}^{(M)}(\vec{\mathbf{R}}). \quad (3.38)$$

lembrando que o primeiro termo do l.e. da equação acima é o vetor  $\vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{R}})$  (veja eq.(3.26a)), podemos observar que a mudança de base leva a uma transformação de calibre abeliana clássica.

Para  $t = T$ , no caso particular em que os campos clássicos descrevem um circuito fechado  $\mathcal{C}$  no espaço de  $\vec{\mathbf{R}}$ , podemos aplicar o Teorema de Stokes, de forma que

$$\begin{aligned} \oint_{\mathcal{C}} \vec{A}'_{\alpha}{}^{(M)}(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} &= \int_S (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \times \vec{A}'_{\alpha}{}^{(M)}(\vec{\mathbf{R}})) \cdot \hat{n} ds \\ &= \oint_{\mathcal{C}} \vec{\mathbf{A}}_{\alpha}{}^{(M)}(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Sendo nulo o rotacional de um gradiente, obtemos mais uma vez a eq.(3.29), confirmando o resultado anteriormente obtido no capítulo 2, com a conservação da fase de Berry numa nova base:

$$\gamma_M(C) = \oint_C d\vec{\mathbf{R}} \cdot \vec{\mathbf{A}}_M(\vec{\mathbf{R}}). \quad (3.40)$$

## 3.2 Hamiltonianas de Espectro Degenerado

Analisaremos agora o caso em que a hamiltoniana tem o espectro degenerado,  $D_m > 1$ , com o grau de degenerescência invariante no tempo. Retornamos à eq.(3.15) e aplicamos o Teorema Adiabático, a cada instante  $t$ , nos elementos de matriz  ${}_s\langle \varphi_{n_{i+1}}^{(l_{n_{i+1}})}; t_{n_{i+1}} | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_s(t_{n_i})} | \varphi_{n_i}^{(l_{n_i})}; t_i \rangle_s$ , que afirma que  $e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_s(t_{n_i})} | \varphi_{n_i}^{(l_{n_i})}; t_i \rangle_s$  é um estado no instante  $(t_i + \Delta t)$  resultante da superposição dos estados degenerados  $l_{n_i}$ , com número quântico  $n_i$  (veja a eq.(A.15)). Substituindo este resultado em cada intervalo  $\Delta t$  do l.d. da eq.(3.15), respeitando a ordem em que estes aparecem, obtemos:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{\mathbf{x}}, t) &= \sum_M \sum_{l_M=1}^{D_M} \sum_{l_{n_1}, \dots, l_{n_{N-1}}=1}^{D_M} c_M^{(l_M)}(0) \varphi_M^{(l_M)}(\vec{\mathbf{x}}; t) \times \\ &\times \left[ \left( \delta_{l_{n_{N-1}}, l_{n_{N-2}}} - {}_s\langle \varphi_M^{(l_{n_{N-1}})}; \Delta t_{N-2} | \left( \frac{d}{dt} | \varphi_M^{(l_{n_{N-2}})}; \Delta t_{N-2} \rangle_s \right) \cdot \Delta t \right) \right] \times \\ &\times \left[ \left( \delta_{l_{n_{N-2}}, l_{n_{N-3}}} - {}_s\langle \varphi_M^{(l_{n_{N-2}})}; \Delta t_{(N-3)} | \left( \frac{d}{dt} | \varphi_M^{(l_{n_{N-3}})}; \Delta t_{(N-3)} \rangle_s \right) \cdot \Delta t \right) \right] \times \dots \\ &\dots \times \left[ \left( \delta_{l_{n_2}, l_{n_1}} - {}_s\langle \varphi_M^{(l_{n_2})}; \Delta t_1 | \left( \frac{d}{dt} | \varphi_M^{(l_{n_1})}; \Delta t_1 \rangle_s \right) \cdot \Delta t \right) \right] \times \\ &\times \left[ \left( \delta_{l_{n_1}, l_M} - {}_s\langle \varphi_M^{(l_{n_1})}; 0 | \left( \frac{d}{dt} | \varphi_M^{(l_M)}; 0 \rangle_s \right) \cdot \Delta t \right) \right] \times \\ &\times e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t E_M(\Delta t_{N-1})} e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t E_M(\Delta t_{(N-2)})} \dots e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t E_M(\Delta t_1)} e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t E_M(0)}. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Para simplificar esta equação, utilizamos a definição dada na Ref.[6]:

$$A_{ij}^{(M)}(t) \equiv {}_s \langle \varphi_M^{(i)}; t | \left( \frac{d|\varphi_M^{(j)}; t\rangle_s}{dt} \right), \quad (3.42)$$

onde  $i, j = 1, 2, \dots, D_M$ . Temos então para a função de onda:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= \sum_M \sum_{l_M=1}^{D_M} \sum_{l_{n_1}, \dots, l_{n_{N-1}}=1}^{D_M} c_M^{(l_M)}(0) \varphi_M^{(l_M)}(\vec{x}; t) \left[ \delta_{l_{n_{N-1}}, l_{n_{N-2}}} - A_{l_{n_{N-1}}, l_{n_{N-2}}}^M(t) \Delta t \right] \\ &\times \left[ \delta_{l_{n_{N-2}}, l_{n_{N-3}}} - A_{l_{n_{N-2}}, l_{n_{N-3}}}^M(t) \Delta t \right] \times \dots \times \left[ \delta_{l_{n_2}, l_{n_1}} - A_{l_{n_2}, l_{n_1}}^M(t) \Delta t \right] \times \\ &\times \left[ \delta_{l_{n_1}, l_{n_M}} - A_{l_{n_1}, l_{n_M}}^M(t) \Delta t \right] \times \\ &\times e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t E_M(\Delta t_{N-1})} e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t E_M(\Delta t_{(N-2)})} \dots e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t E_M(\Delta t_1)} e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t E_M(0)}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

No limite em que  $N \rightarrow \infty$  e, conseqüentemente,  $\Delta t \rightarrow 0$ , identificamos os termos entre colchetes da eq.(3.43) como sendo a expansão até primeira ordem em  $\Delta t$  da exponencial da matriz  $\mathbf{A}_M(t)$ , observando que as  $\delta_{l_{n_i}, l_{n_{i+1}}}$  no l.d. da eq.(3.43) são os elementos da matriz identidade  $\mathbf{1}$ :

$$e^{A_M \Delta t} = \mathbf{1} + A_M \Delta t + \mathcal{O}((\Delta t)^2). \quad (3.44)$$

Chegamos assim à seguinte expressão para a função de onda:

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_M \sum_{l_M=1}^{D_M} c_M^{(l_M)}(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_M(t')} \sum_{l'_M=1}^{D_M} \varphi_M^{(l'_M)}(\vec{x}, t) U_{l'_M, l_M}^{(M)}(t), \quad (3.45)$$

onde

$$\begin{aligned} U_{l'_M, l_M}^{(M)}(t) &\stackrel{\Delta t \rightarrow 0}{\equiv} \left[ e^{-\Delta t A_M((N-1)\Delta t)} \dots e^{-\Delta t A_M(\Delta t)} e^{-\Delta t A_M(0)} \right]_{l'_M, l_M} \\ &= \mathcal{T} \left[ e^{-\int_0^t dt' A_M(t')} \right]_{l'_M, l_M}, \end{aligned} \quad (3.46)$$

e  $\mathcal{T}$  é o operador de ordenação temporal [7].

Uma vez que os vetores  $|\varphi_M^{(i)}; t\rangle_s$  pertencem a uma base instantânea, completa e ortonormal da hamiltoniana, a cada instante  $t$  temos:

$${}_s\langle\varphi_M^{(i)}; t|\varphi_M^{(j)}; t\rangle_s = \delta_{i,j}. \quad (3.47)$$

Derivando esta equação no tempo, encontramos:

$$\frac{d_s\langle\varphi_M^{(i)}; t|\varphi_M^{(j)}; t\rangle_s}{dt} + {}_s\langle\varphi_M^{(i)}; t|\frac{d|\varphi_M^{(j)}; t\rangle_s}{dt} = 0 \quad (3.48)$$

que nos permite escrever

$$\begin{aligned} \frac{d_s\langle\varphi_M^{(i)}; t|\varphi_M^{(j)}; t\rangle_s}{dt} &= -{}_s\langle\varphi_M^{(i)}; t|\frac{d|\varphi_M^{(j)}; t\rangle_s}{dt} \\ &= -\left[\frac{d_s\langle\varphi_M^{(j)}; t|\varphi_M^{(i)}; t\rangle_s}{dt}\right]^*. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Substituindo o resultado (3.49) na definição (3.42) para a matriz  $A_M(t)$ , obtemos

$$A_{ij}^{(M)}(t) = -\left(A_{ji}^{(M)}(t)\right)^*, \quad (3.50a)$$

ou seja, a matriz  $A_M(t)$  é anti-hermitiana.

$$A_M(t) = -A_M^\dagger(t). \quad (3.50b)$$

Como conseqüência, o operador  $U_{l'_M, l_M}^{(M)}(t)$ , eq.(3.46), tem o seu hermitiano conjugado dado por:

$$\begin{aligned} U_{l'_M, l'_M}^{\dagger(M)}(t) &\stackrel{\Delta t \rightarrow 0}{=} \left[ e^{\Delta t A_M(0)} e^{\Delta t A_M(\Delta t)} \dots e^{\Delta t A_M((N-1)\Delta t)} \right]_{l'_M, l'_M} \\ &= \mathcal{T} \left[ e^{\int_0^t dt' A_M(t')} \right]_{l'_M, l'_M}, \end{aligned} \quad (3.51)$$

sendo desta forma o operador dado pela eq.(3.46) um operador unitário:

$$\begin{aligned} U_{l'_M, l'_M}^{(M)}(t).U_{l_M, l_M}^{\dagger(M)}(t) &= \left[ e^{-\Delta t A_M((N-1)\Delta t)} \dots e^{-\Delta t A_M(\Delta t)} e^{-\Delta t A_M(0)} \right]_{l'_M, l'_M} \times \\ &\times \left[ e^{\Delta t A_M(0)} e^{\Delta t A_M(\Delta t)} \dots e^{\Delta t A_M((N-1)\Delta t)} \right]_{l_M, l_M} \\ &= \mathbf{1}, \end{aligned} \quad (3.52)$$

confirmando as eqs.(3.10).

Com a condição da dependência temporal indireta da hamiltoniana, através dos campos clássicos  $\vec{\mathbf{R}}(t)$ , e da definição dada pela eq.(3.42), reescrevemos os elementos da matriz  $A_M(t)$  como:

$$\begin{aligned} A_{ij}^{(M)} &= {}_s\langle\varphi_M^{(i)}; \vec{\mathbf{R}}(t)| \left( \vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} |\varphi_M^{(j)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s \right) \cdot \frac{d\vec{\mathbf{R}}}{dt} \\ &\equiv \left[ \vec{A}_M(\vec{\mathbf{R}}(t)) \right]_{ij} \cdot \frac{d\vec{\mathbf{R}}}{dt}, \end{aligned} \quad (3.53)$$

onde estamos utilizando:  $d\vec{\mathbf{R}}(t) = dX(t)\hat{i} + dY(t)\hat{j} + dZ(t)\hat{k}$ ,  $\vec{A}_M \equiv A_x^M(t)\hat{i} + A_y^M(t)\hat{j} + A_z^M(t)\hat{k}$  e o gradiente em relação a  $\vec{\mathbf{R}}$  é dado pela eq.(3.28). As componentes cartesianas dos elementos da matriz  $A_M(t)$  são dadas por:

$$\left[ A_w^M(t) \right]_{ij} \equiv {}_s\langle\varphi_M^{(i)}; \vec{\mathbf{R}}(t)| \left( \frac{d|\varphi_M^{(j)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle_s}{dw(t)} \right), \quad (3.54)$$

onde  $w = X, Y$  e  $Z$ .

Desta maneira chegamos à expressão final para a função de onda:

$$\psi(\vec{\mathbf{x}}, t) = \sum_M \sum_{l_M=1}^{D_M} c_M^{(l_M)}(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_M(t')} \sum_{l'_M=1}^{D_M} \varphi_M^{(l'_M)}(\vec{\mathbf{x}}, t) \mathcal{P} \left[ e^{-\int_{\vec{\mathbf{R}}(0)}^{\vec{\mathbf{R}}(t)} \vec{A}_M(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}}} \right]_{l'_M, l_M}, \quad (3.55)$$

onde  $\mathcal{P}$  é o operador de ordenação espacial [7].

Este é o resultado para um sistema governado por uma hamiltoniana cíclica e de espectro degenerado que evolui adiabaticamente no tempo, interagindo com o meio através de campos clássicos. Por comparação, podemos constatar que este resultado está em concordância com aqueles conhecidos na literatura [3] e [6]. Observamos, ainda, que as trajetórias possíveis seguidas pelo sistema são aquelas dadas em função da evolução dos vetores do subespaço degenerado de mesmo autovalor de energia.

Para verificarmos como as fases geométricas se comportam sob uma mudança de base, escolhemos agora uma nova base, ortonormal e completa, composta pelo

conjunto de autoestados da hamiltoniana  $\{|\phi_n^{(l_n)}; t\rangle_s\}$ , tal que a cada instante  $t$  a nova base está relacionada com a anterior na forma:

$$|\phi_M^{(l'_M)}; t\rangle_s = \sum_{l_M=1}^{D_M} [\mathcal{V}_M]_{l'_M, l_M} (t) |\phi_M^{(l_M)}; t\rangle_s, \quad (3.56)$$

sendo o vetor de estado no instante inicial dado por:

$$|\psi(0)\rangle_s = \sum_M \sum_{l'_M=1}^{D_M} d_M^{(l'_M)}(0) |\phi_M^{(l'_M)}; 0\rangle_s, \quad (3.57)$$

onde

$$d_M^{(l'_M)}(0) \equiv \sum_{l_M=1}^{D_M} c_M^{(l_M)}(0) [\mathcal{V}_M^\dagger]_{l'_M, l_M}. \quad (3.58)$$

Para um instante qualquer temos a relação entre os coeficientes:

$$d_M^{(l'_M)}(t) \equiv \sum_{l_M=1}^{D_M} c_M^{(l_M)}(t) [\mathcal{V}_M^\dagger]_{l'_M, l_M}, \quad (3.59)$$

de modo que podemos escrever a propriedade de ortonormalidade da nova base em função da base anterior como:

$$\begin{aligned} {}_s\langle\phi_m^{(j)}; t|\phi_n^{(i)}; t\rangle_s &= \sum_{p,q=1}^{D_n, D_m} [\mathcal{V}_m^\dagger]_{j,q} [\mathcal{V}_n(t)]_{i,p} \underbrace{{}_s\langle\phi_m^{(q)}; t|\phi_n^{(p)}; t\rangle_s}_{\delta_{n,m}\delta_{q,p}} \\ &= \delta_{ij} \delta_{nm} \end{aligned} \quad (3.60)$$

de onde encontramos que  $\mathcal{V}_M(t)$  é unitária:

$$\mathcal{V}_M^\dagger(t) \mathcal{V}_M(t) = \mathbf{1}. \quad (3.61)$$

Assim, para um instante  $t$  qualquer, o vetor de estado do sistema é descrito nas duas bases:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_s &= \sum_M \sum_{l'_M=1}^{D_M} d_M^{(l'_M)}(t) |\phi_M^{(l'_M)}; t\rangle_s \\ &= \sum_M \sum_{l_M=1}^{D_M} c_M^{(l_M)}(t) |\phi_M^{(l_M)}; t\rangle_s. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Repetindo os passos que levaram da eq.(3.4) até a eq.(3.45), no espectro degenerado, obtemos a função de onda na nova base como:

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_M \sum_{l'_M, l''_M=1}^{D_M} d_M^{(l'_M)}(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_M(t')} \phi_M^{(l''_M)}(\vec{x}, t) \left[ \tilde{U}_M(t) \right]_{l'_M, l''_M}, \quad (3.63)$$

onde

$$\left[ \tilde{U}_M(t) \right]_{l'_M, l''_M} = \mathcal{T} \left[ e^{-\int_0^t dt' \tilde{A}_M(t')} \right]_{l'_M, l''_M}, \quad (3.64)$$

e estando os elementos da matriz  $\tilde{A}_M(t)$  definidos por:

$$\tilde{A}_{ji}^M(t) \equiv {}_s \langle \phi_M^{(j)} | \left( \frac{d|\phi_M^{(i)}; t\rangle_s}{dt} \right), \quad i, j = 1, 2, \dots, D_M. \quad (3.65)$$

A transformação de uma base na outra leva à seguinte relação entre os elementos das matrizes  $A_M$  e  $\tilde{A}_M$ :

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{ji}^M(t) &= {}_s \langle \phi_M^{(j)}; t | \left( \frac{d}{dt} |\phi_M^{(i)}; t\rangle_s \right) \\ &= \sum_{p,q=1}^{D_M} \left[ \mathcal{V}_M^\dagger(t) \right]_{jq} {}_s \langle \varphi_M^{(q)}; t | \frac{d}{dt} \left( [\mathcal{V}_M(t)]_{pi} |\varphi_M^{(p)}; t\rangle_s \right) \\ &= \sum_{p,q=1}^{D_M} \left[ \mathcal{V}_M^\dagger(t) \right]_{jq} \left[ \left( \frac{d}{dt} [\mathcal{V}_M(t)]_{pi} \right) \underbrace{{}_s \langle \varphi_n^{(q)}; t | \varphi_n^{(p)}; t\rangle_s}_{\delta_{pq}} + \right. \\ &\quad \left. + [\mathcal{V}_M(t)]_{pi} {}_s \langle \varphi_M^{(q)}; t | \frac{d}{dt} (|\varphi_M^{(p)}; t\rangle_s) \right]. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Portanto,

$$\tilde{A}_{ji}^M(t) = \sum_{p=1}^{D_M} \left[ \mathcal{V}_M^\dagger(t) \right]_{jp} \left\{ \frac{d}{dt} [\mathcal{V}_M(t)]_{pi} \right\} + \sum_{p,q=1}^{D_M} \left[ \mathcal{V}_M^\dagger(t) \right]_{jq} A_{qp}^M(t) [\mathcal{V}_M(t)]_{pi}, \quad (3.67)$$

que na forma matricial resulta em:

$$\tilde{A}_M(t) = \mathcal{V}_M^\dagger(t) \left( \frac{d}{dt} \mathcal{V}_M(t) \right) + \mathcal{V}_M^\dagger(t) A_M(t) \mathcal{V}_M(t), \quad (3.68)$$

que é a lei de transformação de um potencial de calibre clássico de uma teoria de calibre clássica não-abeliana.

Para anularmos as fases geométricas na nova base, impomos a condição sobre a matriz  $\mathcal{V}_M(t)$  tal que  $\tilde{A}_M(t) = 0$ :

$$\frac{d}{dt}\mathcal{V}_M(t) = -A_M(t)\mathcal{V}_M(t), \quad (3.69)$$

que, substituída na eq.(3.68), nos fornece diretamente o resultado desejado.

A eq.(3.69) tem a solução:

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_M(t) &= \mathcal{V}_M(0)\mathcal{T}\left[e^{-\int_0^t A_M(\vec{\mathbf{R}}(t)) dt}\right], \\ &= \mathcal{V}_M(0)\mathcal{P}\left[e^{-\int_{\vec{\mathbf{R}}(0)}^{\vec{\mathbf{R}}(t)} \tilde{\mathbf{A}}_M(\vec{\mathbf{R}}).d\vec{\mathbf{R}}}\right]. \end{aligned} \quad (3.70)$$

No caso particular em que  $t = T$ , temos a igualdade  $\mathcal{V}_M(T) = \mathcal{V}_M(0)$ , o que implica que teremos um único resultado possível, neste instante, para o operador de ordenação espacial da base anterior:

$$\mathcal{P}\left[e^{-\oint \tilde{\mathbf{A}}_M(\vec{\mathbf{R}}).d\vec{\mathbf{R}}}\right] = \mathbf{1}. \quad (3.71)$$

Esta restrição não é válida, em geral, e desta forma não é possível encontrar uma transformação unitária que permita eliminar as fases de Berry com uma mudança de base para o intervalo fechado  $[0, T]$ , ou seja, não é possível encontrar  $\tilde{A}_M(t) = 0$  para todo o intervalo.

## Capítulo 4

# CONCLUSÃO

Através da formulação global da Mecânica Quântica, as integrais de trajetória, mostramos como um sistema que evolui no tempo submetido à condição adiabática ( $T \gg T_r$ ), governado por uma hamiltoniana cíclica que depende do tempo de forma indireta, através de campos clássicos, adquire as fases de Berry. Realizamos nosso estudo em duas etapas, na primeira para um sistema governado por uma hamiltoniana de espectro não-degenerado e na segunda para o caso de uma hamiltoniana de espectro degenerado. Verificamos que, tanto num caso quanto noutro, as fases resultam diretamente da aplicação do Teorema Adiabático sobre as integrais de trajetória da evolução dos autoestados instantâneos de energia. Mostramos na formulação integral que trajetórias são compatíveis com o Teorema Adiabático, que descreve a evolução de um sistema quântico sob um regime adiabático. As trajetórias seguidas pelo sistema quântico correspondem à evolução no tempo dos autoestados instantâneos de energia, os quais formam bases apropriadas para descrever o espaço de Hilbert em qualquer instante  $t$ . Para o caso do espectro de energia não-degenerado, sendo o estado inicial do sistema dado por um autoestado da hamiltoniana, encontramos que a trajetória seguida

pelo sistema é única e correspondente à evolução deste autoestado de energia. No caso mais geral, do espectro degenerado, vimos que as trajetórias possíveis são aquelas dadas em função da evolução dos vetores do sub-espço degenerado de mesmo autovalor de energia. Neste último caso, as fases de Berry têm uma estrutura não-abeliana clássica, que foi apresentada inicialmente na Ref.[3].

Estendemos ao caso do espectro de energia degenerado a aplicação da formulação global da M.Q. para a evolução adiabática de sistemas quânticos proposta por M.V. Berry na Ref.[5], encontrando os resultados obtidos anteriormente por M.V. Berry na Ref.[2] e por Wilczek e Zee[3, 6], que utilizaram a formulação local da M.Q. Em ambos os contextos (local e global) a interação do sistema quântico com sua vizinhança ocorreu através de um conjunto de parâmetros clássicos dependentes do tempo, ou de forma equivalente, por componentes de uma função vetorial de dimensão finita  $\vec{\mathbf{R}}(t)$ .

Usualmente se utiliza a representação de Schrödinger para discutir a presença de fases geométricas em evolução adiabática. Nesta representação a dinâmica do sistema está contida nos vetores de estado. Por uma questão de completeza, mostramos como as fases de Berry, que são físicas e portanto são independentes da representação, se manifestam na representação de Heisenberg, onde a dinâmica está contida na evolução dos operadores associados às quantidades físicas.

Finalmente, o Teorema Adiabático foi demonstrado por Born e Fock em 1928[1] usando uma notação bastante envolvente. Utilizamos esta tese para apresentar uma demonstração alternativa desse teorema usando a notação de Dirac.

Esta tese teve como objetivo principal mostrar como aplicar no formalismo de integral de trajetória o Teorema Adiabático. Fizemos essa aplicação para sistemas fechados e esperamos no futuro estender a sua aplicação a sistemas abertos que envolvam dissipação.

# Apêndice A

## Teorema Adiabático

O Teorema Adiabático trata da dinâmica de hamiltonianas dependentes do tempo que governam sistemas que contêm interações com escalas de tempo muito diferentes tais como, por exemplo, frequências de transições eletrônicas e frequências de oscilação de núcleos em moléculas [1]. Consideramos um sistema no qual a hamiltoniana que governa os fenômenos quânticos, caracterizados pelo período  $T_r$ , interage com o meio externo através de campos *clássicos*, com o período  $T$ . A utilização da aproximação adiabática está condicionada à relação  $T \gg T_r$ , tal que, enquanto os fenômenos governados pela hamiltoniana se sucedem esta não sofre variação apreciável. Dizemos aproximação adiabática pois, estritamente, o Teorema Adiabático só é válido quando  $T \rightarrow \infty$ , pois a sua demonstração depende do Teorema de Riemann-Lebesgue [8], o qual nos afirma que:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \int_a^b F(x) e^{ikx} dx = 0, \quad (\text{A.1})$$

onde  $F(x)$  é uma função contínua no intervalo  $[a, b]$ .

Seja então um sistema quântico governado por uma hamiltoniana  $\mathbf{H}(t)$  que varia lentamente no tempo com um período característico  $T$ . Por hipótese, os fenômenos quânticos governados por essa hamiltoniana ocorrem numa frequên-

cia relativamente alta de modo que, comparativamente,  $T \gg T_r$ , onde  $T_r$  é o período característico dos fenômenos quânticos. Trabalhando na *representação de Schrödinger*, o sistema inicialmente se encontra no estado  $|\psi(0)\rangle$ , evoluindo no tempo para um estado  $|\psi(t)\rangle$ , segundo a equação dinâmica:

$$\mathbf{H}(t) |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}, \quad (\text{A.2})$$

onde a hamiltoniana pode ter o espectro de energia degenerado. Deste modo, a cada instante temos a equação de autovalor:

$$\mathbf{H}(t) |\varphi_n^{(l_n)}; t\rangle = E_n(t) |\varphi_n^{(l_n)}; t\rangle, \quad l_n = 1, 2, \dots, D_n, \quad (\text{A.3})$$

sendo  $D_n$  o grau de degenerescência dos autovalores  $E_n(t)$ , tal que  $E_n(t) \neq E_m(t)$  para  $n \neq m$ , e onde o conjunto de autovetores forma uma base completa e ortonormal em cada instante  $t$ ,

$$\sum_n \sum_{l_n=1}^{D_n} |\varphi_n^{(l_n)}; t\rangle \langle \varphi_n^{(l_n)}; t| = \mathbf{1} \quad (\text{A.4})$$

e

$$\langle \varphi_n^{(l_n)}; t | \varphi_m^{(l_m)}; t \rangle = \delta_{nm} \delta_{l_n l_m}, \quad (\text{A.5})$$

sendo  $\mathbf{1}$  o operador identidade. O grau de degenerescência de cada autovalor  $E_n(t)$  não varia no tempo.

Definimos agora a variável adimensional  $s$  como:

$$s \equiv \frac{t}{T}, \quad (\text{A.6})$$

de modo que para cada "instante"  $s$  temos:

$$|\psi(s)\rangle = \sum_n \sum_{l_n=1}^{D_n} c_n^{(l_n)}(s) e^{-\frac{iT}{\hbar} \int_0^s ds' E_n(s')} |\varphi_n^{(l_n)}; s\rangle. \quad (\text{A.7})$$

Substituindo a eq.(A.7) na equação de Schrödinger (A.2), obtemos o conjunto de equações acopladas para os coeficientes  $c_m^{(l_m)}(s)$ :

$$\frac{dc_m^{(l_m)}(s)}{ds} = - \sum_n \sum_{l_n=1}^{D_n} e^{\frac{iT}{\hbar} \int_0^s ds' [E_m(s') - E_n(s')]} \langle \varphi_m^{(l_m)}; s | \left( \frac{d|\varphi_n^{(l_n)}; s\rangle}{ds} \right) c_n^{(l_n)}(s), \quad (\text{A.8})$$

com  $l_m = 1, 2, \dots, D_m$ .

Seguindo os passos desenvolvidos no Capítulo 2, da eq.(2.8) até a eq.(2.10), encontramos para os termos em que  $n \neq m$ :

$$\langle \varphi_m^{(l_m)}; s | \left( \frac{d|\varphi_n^{(l_n)}; s\rangle}{ds} \right) = \frac{\langle \varphi_m^{(l_m)}; s | \frac{d\mathbf{H}(s)}{ds} | \varphi_n^{(l_n)}; s \rangle}{[E_n(s) - E_m(s)]}, \quad (\text{A.9})$$

observando que o denominador do l.d. desta equação não se anula.

Substituindo este resultado na eq.(A.8), e separando os termos de energia  $E_n(s) \neq E_m(s)$ , temos:

$$\begin{aligned} \frac{dc_m^{(l_m)}(s)}{ds} &= - \sum_{l'_m=1}^{D_m} \langle \varphi_m^{(l_m)}; s | \left( \frac{d|\varphi_m^{(l'_m)}; s\rangle}{ds} \right) c_m^{(l'_m)}(s) - \\ &- \sum_{\substack{n \neq m \\ l_n=1}}^{D_n} e^{\frac{iT}{\hbar} \int_0^s ds' [E_m(s') - E_n(s')]} \frac{\langle \varphi_m^{(l_m)}; s | \frac{d\mathbf{H}(s)}{ds} | \varphi_n^{(l_n)}; s \rangle}{[E_n(s) - E_m(s)]} c_n^{(l_n)}(s). \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Integrando a equação anterior em  $s$ , obtemos:

$$\begin{aligned} c_m^{(l_m)}(s) &= c_m^{(l_m)}(0) - \sum_{l'_m=1}^{D_m} \int_0^s ds_1 \langle \varphi_m^{(l_m)}; s_1 | \left( \frac{d|\varphi_m^{(l'_m)}; s_1\rangle}{ds_1} \right) c_m^{(l'_m)}(s_1) - \\ &- \sum_{\substack{n \neq m \\ l_n=1}}^{D_n} \int_0^s ds_1 e^{\frac{iT}{\hbar} \int_0^{s_1} ds' [E_m(s') - E_n(s')]} \frac{\langle \varphi_m^{(l_m)}; s_1 | \left( \frac{d\mathbf{H}(s_1)}{ds_1} \right) | \varphi_n^{(l_n)}; s_1 \rangle}{[E_n(s_1) - E_m(s_1)]} c_n^{(l_n)}(s_1), \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

para  $s \geq 0$ .

Focando nossa atenção na integral que aparece no terceiro termo do l.d. da eq.(A.11), queremos reescrevê-lo utilizando o Teorema de Riemann-Lebesgue, eq.(A.1).

Definindo:

$$I_{n,m}^{(l_n,l_m)} \equiv \int_0^s ds_1 e^{\frac{iT}{\hbar} \int_0^{s_1} ds' [E_m(s') - E_n(s')]} \frac{\langle \varphi_m^{(l_m)}; s_1 | \frac{d\mathbf{H}(s_1)}{ds_1} | \varphi_n^{(l_n)}; s_1 \rangle}{[E_n(s_1) - E_m(s_1)]} c_n^{(l_n)}(s_1) \quad (\text{A.12})$$

e

$$g(s) \equiv \frac{1}{\hbar} \int_0^s ds_1 [E_m(s_1) - E_n(s_1)], \quad (\text{A.13})$$

observando que a integração deve ser realizada no limite adiabático,  $T \rightarrow \infty$ , podemos enfim reescrever a integral (A.12), para  $n \neq m$ , como:

$$\begin{aligned} I_{n,m}^{(l_n,l_m)}(s) &= - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{\hbar} \int_{g(0)}^{g(s)} \frac{dg}{\dot{g}} e^{iTg} \langle \varphi_m^{(l_m)}; g | \left( \frac{d\mathbf{H}(g)}{dg} \right) | \varphi_n^{(l_n)}; g \rangle c_n^{(l_n)}(g) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Estamos usando a notação:  $\dot{g} \equiv dg(s)/ds$ , de forma que esta equação é semelhante à eq.(A.1) e, como aquela, anula-se.

Então, no limite em que  $T \rightarrow \infty$ , temos:

$$c_m^{(l_m)}(s) = c_m^{(l_m)}(0) - \sum_{l'_m=1}^{D_m} \int_0^s ds_1 \langle \varphi_m^{(l_m)}; s_1 | \left( \frac{d|\varphi_m^{(l'_m)}; s_1\rangle}{ds_1} \right) c_m^{(l'_m)}(s_1), \quad (\text{A.15})$$

ou, na forma diferencial,

$$\frac{dc_m^{(l_m)}(s)}{ds} = - \sum_{l'_m=1}^{D_m} \langle \varphi_m^{(l_m)}; s | \left( \frac{d|\varphi_m^{(l'_m)}; s\rangle}{ds_1} \right) c_m^{(l'_m)}(s), \quad (\text{A.16})$$

que é o resultado do Teorema Adiabático. Da eq.(A.16) verificamos que na evolução adiabática só temos possibilidade de transição ( $c_m^{(l_m)}(s) \neq 0$ , para a condição inicial  $c_m^{(l_m)}(0) = 0$ ) entre autoestados instantâneos do autovalor degenerado  $E_m(0)$ , que pertence ao espectro do vetor de estado inicial  $|\psi(0)\rangle$ .

# Apêndice B

## Representações Unitárias e a Evolução Adiabática

Dizemos que uma transformação na M.Q. é unitária quando o produto do operador associado à transformação com o seu hermitiano conjugado resulta no operador identidade. Temos como exemplo o operador evolução temporal  $\mathbf{U}(t_{n+1}, t_n)$  (veja a eq.(3.11)), que relaciona o vetor de estado que descreve o sistema dado num instante qualquer  $t_n$  com o vetor de estado no instante  $t_{n+1}$ . O operador de evolução no tempo satisfaz a condição:

$$\mathbf{U}(t_{n+1}; t_n)\mathbf{U}^\dagger(t_{n+1}; t_n) = \mathbf{1}. \quad (\text{B.1})$$

As duas representações mais usuais nos livros-textos de M.Q. nas quais descrevemos a dinâmica do sistema quântico, e que estão relacionadas por uma transformação unitária, são as representações de *Schrödinger* e de *Heisenberg*. Na representação de *Schrödinger* os vetores de estado do sistema evoluem no tempo enquanto os operadores, que estão associados às medidas do sistema, não. Na representação de *Heisenberg* temos o inverso, os operadores evoluem no tempo enquanto os vetores de estado nesta representação se mantêm constantes.

As fases de Berry, que estudamos neste trabalho, são resultados físicos de medidas realizadas no sistema e, por conseqüência, devem ser as mesmas nessas duas representações e em qualquer outra representação unitária da M.Q. Para verificarmos este resultado, neste apêndice, partimos da representação de *Schrödinger*, onde a dinâmica do sistema está concentrada nos vetores de estado e reescrevemos a função de onda na representação de *Heisenberg*, na qual a dinâmica do sistema está concentrada na evolução temporal dos operadores. Obtemos também a evolução temporal de um operador qualquer para o sistema quântico governado por uma hamiltoniana no regime da aproximação adiabática nessa representação.

Sendo  $\mathbf{H}_S(t)$  a hamiltoniana que governa o sistema quântico na representação de *Schrödinger*, para  $\Delta t \rightarrow 0$ , escrevemos a equação dinâmica como (eq.(3.6)):

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_s \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{|\psi(t + \Delta t)\rangle_s - |\psi(t)\rangle_s}{\Delta t} = -\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t))|\psi(t)\rangle_s, \quad (\text{B.2})$$

que em primeira ordem em  $\Delta t$ , é reescrita:

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle_s = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}_s(\vec{\mathbf{R}}(t))\cdot\Delta t}|\psi(t)\rangle_s, \quad (\text{B.3})$$

onde  $e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t\mathbf{H}_s(t)} \equiv \mathbf{U}(t + \Delta t; t)$ .

Além da dependência no tempo, estamos trabalhando no caso mais geral, em que não é garantido que a hamiltoniana comute consigo mesma em instantes diferentes. Isto nos leva a dividir o intervalo de observação do sistema,  $[0, t]$ , em  $N$  subintervalos iguais  $\Delta t$ , tal que  $\Delta t = t/N$  e quando  $N \rightarrow \infty$ ,  $\Delta t \rightarrow 0$ , de forma que o operador evolução, do instante inicial a um instante  $t$  qualquer, será dado por uma seqüência de operadores unitários instantâneos:

$$\mathbf{U}(t, 0) = \mathbf{U}(t_N; t_{N-1})\mathbf{U}(t_{N-1}; t_{N-2})\dots\mathbf{U}(t_1; 0), \quad (\text{B.4})$$

onde  $t_n = n\cdot\Delta t$ .

Num instante  $t$  qualquer temos então para o vetor de estado:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_S &= e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}\mathbf{H}_S((N-1)\Delta t)} \dots e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}\mathbf{H}_S(\Delta t)} e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}\mathbf{H}_S(0)} |\psi(0)\rangle_S \\ &= \mathcal{T} \left[ e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \mathbf{H}_S(t')} \right] |\psi(0)\rangle_S, \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

onde  $\mathcal{T}$  é o operador de ordenação temporal [7].

Para irmos de uma representação a outra, impomos a condição de que o produto escalar em qualquer instante  $t$  deva ser independente da representação utilizada,  ${}_S\langle\phi(t)|\mathbf{O}_S|\psi(t)\rangle_S = {}_\sigma\langle\phi(t)|\mathbf{O}_\sigma|\psi(t)\rangle_\sigma$ , onde o índice  $s$  indica a representação de *Schrödinger* e  $\sigma$  uma outra representação unitária qualquer.

Particularmente, para as representações de *Schrödinger* e de *Heisenberg* temos a transformação unitária que relaciona os vetores de estado e os operadores, por definição:

$$|\psi(t)\rangle_S = \mathbf{U}(t, 0)|\psi\rangle_H \quad (\text{B.6})$$

e

$$\mathbf{O}_S = \mathbf{U}(t, 0) \mathbf{O}_H(t) \mathbf{U}^\dagger(t, 0), \quad (\text{B.7})$$

Escolhemos  $\mathbf{U}(t, 0)$  tal que  $\mathbf{U}(0, 0) = \mathbf{1}$  e, portanto, para o instante inicial, temos:

$$|\psi\rangle_H = |\psi(0)\rangle_S. \quad (\text{B.8})$$

Na representação de *Heisenberg*, na qual os operadores dependem do tempo, podemos obter a equação que descreve a dinâmica do operador num instante

qualquer  $t$ , derivando a eq.(B.7) em relação ao tempo:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \mathbf{O}_H(t) &= \frac{d}{dt} [\mathbf{U}^\dagger(t, 0) \mathbf{O}_S \mathbf{U}(t, 0)] \\
 &= \frac{d\mathbf{U}^\dagger(t, 0)}{dt} \mathbf{O}_S \mathbf{U}(t, 0) + \mathbf{U}^\dagger(t, 0) \frac{d\mathbf{O}_S}{dt} \mathbf{U}(t, 0) \\
 &\quad + \mathbf{U}^\dagger(t, 0) \mathbf{O}_S \frac{d\mathbf{U}(t, 0)}{dt} \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}(t) \underbrace{\mathbf{U}^\dagger(t, 0) \mathbf{O}_S \mathbf{U}(t, 0)}_{\mathbf{O}_H} + \\
 &\quad + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{O}_H - \frac{1}{i\hbar} \underbrace{\mathbf{U}^\dagger(t, 0) \mathbf{O}_S \mathbf{U}(t, 0)}_{\mathbf{O}_H} \mathbf{H}(t), \tag{B.9}
 \end{aligned}$$

e, portanto:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{O}_H = [\mathbf{H}(t), \mathbf{O}_H(t)] + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{O}_H, \tag{B.10}$$

que é a equação de evolução dos operadores na representação de *Heisenberg*, onde  $\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{O}_H \equiv \mathbf{U}^\dagger(t, 0) \frac{d\mathbf{O}_S}{dt} \mathbf{U}(t, 0)$  será um operador não nulo se o operador  $O_s$  depender do tempo.

A função de onda surge como o resultado da projeção do vetor de estado  $|\psi(t)\rangle_S$  ou  $|\psi\rangle_H$  sobre a base do espaço das coordenadas,  $\{|\vec{x}\rangle_S\}$ , ou  $\{|\vec{x}; t\rangle_H\}$ , respectivamente. Ao realizarmos esta projeção, devemos ter o cuidado de observar que o conjunto que forma a base do espaço das coordenadas é composta por autovetores do operador posição  $\vec{\mathbf{X}}$ . Se estivermos trabalhando numa representação em que os operadores variam no tempo, estes terão autovetores definidos a cada instante  $t$ . Na representação de *Heisenberg* temos que o operador posição  $\vec{\mathbf{X}}$  depende do tempo de forma que:

$$\vec{\mathbf{X}}_H(t) |\vec{x}; t\rangle_H = \vec{x} |\vec{x}; t\rangle_H. \tag{B.11}$$

Pela transformação que leva da representação de *Schrödinger* para a representação

de *Heisenberg* temos que:

$$\begin{aligned} |\vec{\mathbf{x}}; t)_H &= \mathbf{U}^\dagger(t, 0)|\vec{\mathbf{x}})_S \\ &= e^{\frac{i\Delta t}{\hbar}\mathbf{H}_S(0)} e^{\frac{i\Delta t}{\hbar}\mathbf{H}_S(\Delta t)} \dots e^{\frac{i\Delta t}{\hbar}\mathbf{H}_S((N-1)\Delta t)}|\vec{\mathbf{x}})_S. \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Portanto, para um instante  $t$  qualquer, a função de onda será assim obtida:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{\mathbf{x}}, t) &= {}_S \langle \vec{\mathbf{x}} | \psi(t) \rangle_S = \\ &= {}_S \langle \vec{\mathbf{x}} | \mathbf{U}(t, 0) | \psi(0) \rangle_S = \\ &= {}_H \langle \vec{\mathbf{x}}; t | \psi \rangle_H, \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

o que demonstra que a função de onda é a mesma nas duas representações.

Neste trabalho seguimos os passos dados por M.V. Berry [5], aplicando a condição da aproximação adiabática na evolução do vetor de estado, na representação de *Schrödinger*. No entanto, o mesmo resultado pode ser obtido na representação de *Heisenberg* se aplicarmos essa condição na evolução dos operadores que, no caso particular da função de onda - operador  $\vec{\mathbf{X}}_H(t)$  - tem a equação de autovalores dada pela eq.(B.11). Assim,

$$\begin{aligned} \psi(\vec{\mathbf{x}}, t) &= {}_H \langle \vec{\mathbf{x}}; t | \psi \rangle_H \\ &= {}_S \langle \vec{\mathbf{x}} | \mathcal{T} \left[ e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \mathbf{H}_S(t')} \right] | \psi(0) \rangle_S. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Finalizando, obtemos agora um operador  $\mathbf{O}_H(t)$  qualquer na representação de *Heisenberg* a partir da representação de *Schrödinger*, para um sistema em que a hamiltoniana evolui no tempo. Como estamos trabalhando no regime de aproximação adiabática, para expressarmos nossos resultados na representação de *Heisenberg*, devemos aplicar o T.A. às grandezas que evoluem no tempo nesta representação, ou seja, os operadores. Reescrevendo a equação que relaciona os

operadores nas representações de *Schrödinger* e de *Heisenberg*, temos:

$$\begin{aligned}\mathbf{O}_H(t) &= \mathbf{U}^\dagger(t, 0) \mathbf{O}_S \mathbf{U}(t, 0) \\ &= e^{\frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{H}_S(0)} \dots e^{\frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{H}_S((N-1)\Delta t)} \mathbf{O}_S e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{H}_S((N-1)\Delta t)} \dots e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar} \mathbf{H}_S(0)}.\end{aligned}\tag{B.15}$$

Na eq.(B.15), verificamos nas exponenciais, que correspondem ao operador evolução, em cada instante  $t$ , a presença da hamiltoniana escrita na representação de *Schrödinger*. Para eliminarmos essas hamiltonianas introduzimos  $2N$  operadores identidade em cada intervalo  $\Delta t$ , assim, com a aplicação do Teorema Adiabático ( $T \rightarrow \infty$ ), para o caso da hamiltoniana de espectro degenerado, encontramos para um operador qualquer na representação de *Heisenberg*:

$$\begin{aligned}\mathbf{O}_H(t) &= \sum_{N,M} \sum_{l_N^{(1)}, l_N^{(2)}=1}^{D_N} \sum_{l_M^{(1)}, l_M^{(2)}=1}^{D_M} e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (E_N(t') - E_M(t'))} |\varphi_N^{(l_N^{(1)})}; 0\rangle_S \langle \varphi_M^{(l_M^{(1)})}; 0| \times \\ &\times \left[ \mathcal{P} \left( e^{-\int_{\vec{\mathbf{R}}(0)}^{\vec{\mathbf{R}}(t)} \vec{A}_N(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}}} \right) \right]_{l_N^{(1)}, l_N^{(2)}}^\dagger \mathcal{O}_{l_N^{(2)}, l_M^{(2)}}(t) \left[ \mathcal{P} \left( e^{-\int_{\vec{\mathbf{R}}(0)}^{\vec{\mathbf{R}}(t)} \vec{A}_M(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}}} \right) \right]_{l_M^{(2)}, l_M^{(1)}},\end{aligned}\tag{B.16}$$

sendo  $\vec{A}_m(\vec{\mathbf{R}})$ ,  $m = N, M$ , as matrizes definidas na eq.(3.43), e os elementos de matriz do operador  $\mathbf{O}_S$ , dados por:

$$\mathcal{O}_{l_N, l_M}(t) \equiv {}_S \langle \varphi_N^{(l_N)}; t | \mathbf{O}_S | \varphi_M^{(l_M)}; t \rangle_S.\tag{B.17}$$

Para o caso não-degenerado fazemos  $l_N = l_M = 1$ .

# Referências Bibliográficas

- [1] M. Born und V. Fock, *Z. Phys.* **51** (1928) 12.
- [2] M.V. Berry, *Proc. R. Soc.* **A392** (1984) 45.
- [3] F. Wilczek and A. Zee, *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984) 2111.
- [4] H. Kuratsuji and S. Iida, *Prog. of Theo. Phys.* **74** (1985) 439.
- [5] M.V. Berry, *Quantum adiabatic anholonomy*, in “*Anomalies, phases, defects - Ferrara, June 1989*”, ed. U.M. Bregola, G. Marmo and G. Morandi (Nápoles, 1990), pág. 125.
- [6] A. Zee, *Phys. Rev.* **A38** (1988) 1.
- [7] M.E. Peskin and D.V. Schroeder, “*Introduction to Quantum Field Theory*”, Addison-Wesley(1995), pág. 85.
- [8] Ruel V. Churchill, “*Fourier series and boundary value problems*”, 2<sup>a</sup> ed., Mc Graw-Hill Inc (1963), pág. 87.