

**UM ESTUDO SOBRE A FASE GEOMÉTRICA DE BERRY E O
EFEITO AHARONOV-BOHM DUAL**

CÁSSIO CECATO FAVARATO

**UM ESTUDO SOBRE A FASE GEOMÉTRICA DE BERRY E O
EFEITO AHARONOV-BOHM DUAL**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências Exatas da Universidade Federal do Espírito Santo como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física, na área de concentração de Física Teórica

ORIENTADOR: HUMBERTO BELICH JUNIOR

Vitória

Novembro de 2014

© 2014, Cássio Cecato Favarato.
Todos os direitos reservados.

Cecato Favarato, Cássio

D1234p Um Estudo sobre a Fase Geométrica de Berry e o Efeito
Aharonov-Bohm Dual / Cássio Cecato Favarato. — Vitória,
2014

xiii, 87 f. : il. ; 29cm

Dissertação (mestrado) — Universidade Federal do
Espírito Santo

Orientador: Humberto Belich Junior

1. — Dissertações. 2. — Dissertações. I. Orientador.
II. Título.

CDU 000.0*00.00

[Folha de Aprovação]

Quando a secretaria do Curso fornecer esta folha, ela deve ser digitalizada e armazenada no disco em formato gráfico.

Se você estiver usando o `pdflatex`, armazene o arquivo preferencialmente em formato PNG (o formato JPEG é pior neste caso).

Se você estiver usando o `latex` (não o `pdflatex`), terá que converter o arquivo gráfico para o formato EPS.

Em seguida, acrescente a opção `approval={nome do arquivo}` ao comando `\ppgccufmg`.

Se a imagem da folha de aprovação precisar ser ajustada, use:
`approval=[ajuste] [escala] {nome do arquivo}`
onde *ajuste* é uma distância para deslocar a imagem para baixo e *escala* é um fator de escala para a imagem. Por exemplo:
`approval=[-2cm] [0.9] {nome do arquivo}`
desloca a imagem 2cm para cima e a escala em 90%.

Dedico esse trabalho aos meus pais Nilton Favarato e Marideia C. Favarato (in memoriam) pela confiança depositada em mim.

*Dedico também a todos aqueles que compartilham comigo
essa aventura de possibilidades surpreendentes que é a vida.*

Agradecimentos

À Deus, à Yeshua.

Um agradecimento especial aos meus pais Nilton Favarato e Marideia C. Favarato (*in memoriam*), exemplos de muita luta, pois sem eles nada disso teria sido possível.

As minhas tias e tios que sempre me acolheram e me encorajaram em momentos difíceis: Dulce, Luzia, Marisa; José Carlos, Domingos e Roméro.

Aos primos por me suportarem pacientemente: Luciano, Davi e Vanessa.

À minha namorada, amiga e sempre companheira Lais.

À Universidade Federal do Espírito Santo.

Ao Programa de Pós-Graduação em Física - PPGFIS.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq, pelo apoio financeiro.

Ao meu orientador Humberto Belich Jr pela paciência e consideração.

Aos professores Sérgio Vitorino e Denise Assafrão Lima, pelo apoio e pelas discussões sobre Física.

Ao professor José Alexandre pelas discussões sobre os mais variados assuntos.

Aos amigos e colegas de curso Alan J. Romanel, Thiaguim Martins, Everson, Leonardo, Amanda, Carol, Thais, Felipe, Eddy, Alonso, Fernandinho, Fábio, Pedrinho, Álefe, Lucas, Henrique, Gustavo, Rafael Pires, Rafael Oliari, Thiago, Fernando Panssini e a todos os inúmeros amigos que direta ou indiretamente contribuíram para o meu sucesso.

“Nenhuma das cordas da vida dura. Por isso, vou andando. Tudo passa.”

(George Harrison)

Resumo

Neste trabalho, nos preocupamos em fazer uma revisão da literatura que aborda a chamada fase geométrica de Berry. Um assunto relativamente recente, que vem sendo empregada em várias áreas da física. Para isso, nós utilizamos uma série de referências, das quais, muitas foram essenciais para a fundamentação teórica desta dissertação.

Em um primeiro momento, nos concentramos no estudo da evolução temporal de sistemas quânticos governados por operadores Hamiltonianos cuja dependência temporal manifesta-se por meio de um conjunto de parâmetros chamados de campos clássicos. A aproximação adiabática é justificada matematicamente quando demonstrado o teorema adiabático. Sob essas condições, reobtemos as fases geométricas - fase de Berry - associadas a esses sistemas em diferentes representações, cada uma delas exibindo sua particularidade.

Por fim, como um caso particular de fase geométrica, estudamos do ponto de vista das transformações de dualidade das equações de Maxwell, o efeito Aharonov-Bohm dual, extraindo a fase geométrica de Berry associada a dinâmica do monopolo magnético na presença do potencial vetor elétrico.

Palavras-chave: Fase geométrica de Berry; Aproximação adiabática; Campos de calibre; Efeito Aharonov-Bohm dual.

Abstract

In this work, we make a review of the literature that the so-called Berry's geometric phase. A recent issue, which has been employed in various areas of physics. For this, we use, in a number of references, in which many were critical to the theoretical foundation of this work.

At first, we focus on the study of the time evolution of quantum systems governed by Hamiltonians operators whose time dependence is manifested by a set of parameters called classical fields. The adiabatic approximation, is justified mathematically when demonstrated the adiabatic theorem. Under these conditions, we obtain geometric phases - Berry's phase - associated with these systems in different representations, each displaying its particularity.

Finally, as a particular case of geometric phase, we study from the viewpoint of duality transformations of Maxwell's equations, the dual Aharonov-Bohm effect, extracting the geometric Berry's phase associated with the dynamics of the magnetic monopole in the presence of the electric vector potential.

Keywords: Berry's geometric phase; Adiabatic approximation; Gauge fields; Dual Aharonov-Bohm effect.

Lista de Figuras

2.1	Transporte paralelo de um vetor ao longo de uma curva geodésica fechada	12
2.2	Ao integrar mais de uma superfície delimitada por uma curva de C	16
5.1	Fluxo de dipólos elétricos no interior do solenóide.	53
5.2	Monopólo magnético executando uma trajetória circular	60
5.3	Efeito Aharonov-Bohm Dual: o feixe de monopólos se divide	64
5.4	A natureza quântica dual, onda-partícula, do monopolo.	65
5.5	Arranjo experimental do mecanismo de fenda dupla.	68
5.6	Adição vetorial	69
5.7	Superfícies hiperbólicas de revolução	70
5.8	Monopolo magnético confinado numa caixa cúbica	72
5.9	O efeito Aharonov-Bohm dual como manifestação da fase de Berry	73
5.10	Fluxo de campo elétrico	74

Lista de Tabelas

5.1	(a) Correspondência entre as grandezas eletromagnéticas associadas as Eqs. (5.11). (b) Correspondência entre as grandezas eletromagnéticas associadas as Eqs. (5.10).	52
5.2	Convenção adotada para distinguir a carga magnética.	62
6.1	Comparação entre os feitos Aharonov-Bohm e Aharonov-Bohm dual.	77

Sumário

Agradecimentos	vi
Resumo	viii
Abstract	ix
Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xi
1 INTRODUÇÃO	1
2 FASE GEOMÉTRICA DE BERRY	4
2.1 Fases geométricas	4
2.1.1 Formulação matemática	5
2.1.2 O número de Chern e a denominação do termo curvatura de Berry . .	14
2.2 Comportamento da fase de Berry sob mudança de base	16
2.3 Representação matricial	20
3 TEOREMA ADIABÁTICO	27
3.1 Demonstração do teorema adiabático para sistemas de espectro degenerado .	28
4 FASE GEOMÉTRICA EM REPRESENTAÇÕES ALTERNATIVAS	32
4.1 Fase geométrica de Berry via representação das integrais de trajetória	32
4.1.1 Fase geométrica de Berry de sistemas quânticos não-degenerados . . .	33
4.1.2 Fase Geométrica de Berry de sistemas quânticos com espectro de energia degenerado	37
4.1.3 Comportamento da matriz $U_M(t)$ sob mudança de base	40
4.2 A Representação de Heisenberg	43
4.2.1 Fase geométrica na representação de Heisenberg	43
5 EFEITO AHARONOV-BOHM DUAL	48
5.1 O potencial vetor dual	49
5.2 A dinâmica quântica	55

5.3	O experimento de interferência por fenda dupla	62
5.4	A fase quântica de Berry	71
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	76
	Referências Bibliográficas	78

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

Por décadas, pouca ou nenhuma importância foi atribuída às fases geométricas adquiridas por sistemas quânticos governados por operadores Hamiltonianos dependentes do tempo. Porém, em 1959, Yakir Aharonov e David Bohm, em coautoria no artigo [1] "*Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory*", investigaram a influência dos potenciais eletromagnéticos em regiões livres de campos ao analisar o padrão de interferência de partículas carregadas na presença de um solenóide (com fluxo de campo em seu interior, região inacessível à partícula) e demonstraram que, em virtude disso, a função de onda das partículas adquiriam uma fase topológica quântica diretamente associada ao potencial vetor. Após essa descoberta, físicos e outros pesquisadores em geral, passaram a crer que a fase (topológica quântica) é um parâmetro essencial para a completa descrição de um sistema quântico.

Em 1984, Michel V. Berry [2] empregando a aproximação adiabática para descrever a evolução temporal de sistemas quânticos, escritos como autoestados do operador Hamiltoniano parametricamente dependente do tempo, demonstrou o surgimento da chamada fase geométrica ou fase de Berry. Originalmente, M.V. Berry se utiliza da formulação diferencial ao adotar a representação de Schrödinger na abordagem dessa teoria.

A partir da publicação do trabalho de Berry [2], o conceito de fases geométricas se popularizou enormemente. E baseado nisso, caracterizamos esse trabalho por ser um compêndio da teoria que trata a chamada fase geométrica de Berry. Selecionamos uma série de artigos e outros trabalhos, dos quais, muitos foram essenciais para elaboração da proposta dessa pesquisa, bem como situar o leitor sobre o que foi feito e o que está sendo feito atualmente a respeito do assunto.

A dissertação está organizada em seis capítulos, este primeiro consiste em uma rápida introdução, discorrendo sobre o que é tratado nos demais capítulos. É bom frisar que a introdução da primeira seção de cada capítulo é dedicada a uma contextualização, situando o leitor em relação ao que será discutido.

O capítulo (2) está organizado em três seções. Em (2.1) foi discutida a formulação matemática da fase de Berry. Para isso, partiu-se do pressuposto de que o operador Hamil-

toniano que descreve o sistema se modificava em uma escala de tempo comparativamente muito maior do que aquela associada a fenômenos quânticos como transições eletrônicas. E disso, resultou a aproximação adiabática.

A fase geométrica é então determinada. E da linearidade da Equação de Schrödinger, o vetor de estado é escrito como uma superposição linear de autoestados do Hamiltoniano o que nos permitiu mostrar sua influência, induzida pela diferença entre as fases geométricas, no cálculo de grandezas como a densidade de probabilidade e o valor médio de um operador Hermitiano. Foram discutidos também os conceitos de conexão de Berry, baseado na ideia de transporte paralelo, de curvatura de Berry e de número de Chern.

Em (2.2) foi investigado o comportamento da fase de Berry mediante uma mudança de base de autoestados, escolhida para representar um sistema quântico. Observou-se então, como consequência desse processo, o surgimento de uma estrutura de calibre Abeliana clássica.

Em (2.3) expusemos um operador de evolução temporal cujo os termos de fase, representados de forma matricial e discutidos na Ref. [3], que discriminava as contribuições: adiabática, dinâmica e não adiabática.

O capítulo (3) é constituído apenas de uma única seção. Em (3.1) foi feita a demonstração do teorema adiabático, originalmente abordada na Ref. [4], empregando para este fim, a identidade de Riemann-Lebesgue.

O capítulo (4) caracteriza-se por ser um estudo das Refs. [4,5], onde abordamos a fase geométrica em representações alternativas. Este capítulo se divide em duas seções. Em (4.1) atacamos a fase geométrica de sistemas quânticos com espectro de energia degenerado e não-degenerado na formulação das integrais de trajetória. Exploramos a lei da composição aplicada ao operador de evolução temporal, subdividindo-o em uma sequência de evoluções temporais, tornando a formulação aplicável. Analisamos ainda o comportamento da fase geométrica, ao realizarmos uma mudança de base mediante uma transformação unitária, de um sistema com espectro de energia degenerado.

Em (4.2) estabelecemos as relações entre as representações de Schrödinger e Heisenberg. Com isso, partindo do caso mais geral em que o sistema possui espectro de energia degenerado, encontramos a fase geométrica associada a dinâmica do operador nessa representação.

O capítulo (5), uma adaptação da Ref. [6], dedica-se a investigação da dinâmica quântica de um monopolo magnético na presença de um solenóide linear com fluxo de campo elétrico confinado em seu interior. Que por sua vez, está organizado em quatro seções. Em (5.1) trabalhamos com as transformações de dualidade das equações de Maxwell, e na ausência de cargas elétricas, encontramos o potencial vetor elétrico dentro e fora do solenóide. Em (5.2) partimos de uma abordagem clássica, empregando o conceito de força e encontrando a Lagrangiana clássica dual para que em seguida fosse determinada a função Hamiltoniana do sistema. Seguimos com a versão quântica desta função, escrevendo a equação de Schrödinger por meio do operador Hamiltoniano. Ao resolver a equação de Schrödinger, encontramos uma solução com o termo de fase de Dirac. O efeito Aharonov-Bohm dual em sua versão de estados ligados também foi abordado.

Em (5.3) empregamos o método das integrais de caminho (não relativístico) para avaliar a distribuição da densidade de probabilidade quando analisados os padrões de difração gerados pelo mecanismo de fenda dupla. Foi considerada também uma analogia ao experimento de fenda dupla de Young. Por fim, em (5.4) obteve-se a fase Berry tal como predito na Ref. [7] e abordado na Ref. [6].

No capítulo (6) foram discutidos os resultados mais relevantes, do ponto de vista teórico, dos conteúdos pertinentes aos capítulos anteriores.

Capítulo 2

FASE GEOMÉTRICA DE BERRY

2.1 Fases geométricas

A fase de Berry, ou fase geométrica de Berry, foi inicialmente proposta por Michel V. Berry em seu trabalho "*Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*" [2]. Ele mostrou, por meio da Equação de Schrödinger que, se o sistema é preparado em um autoestado não degenerado do Hamiltoniano após uma evolução adiabática cíclica, ele retornará ao seu estado original acompanhado por um fator de fase formado por duas parcelas: uma contribuição dinâmica associada a energia do sistema e uma contribuição geométrica associada ao caminho traçado no espaço de parâmetros.

Barry Simon publica o artigo intitulado "*Holonomy, the Quantum Adiabatic Theorem, and Berry's Phase*" [8], onde fornece uma interpretação geométrica da fase de Berry. No mesmo ano, Frank Wilczek e A. Zee [9] generalizaram a construção de Berry e Simon ao aplicarem a teoria a sistemas quânticos com espectro de energia degenerado. Partindo dessa abordagem, eles demonstram o surgimento de uma estrutura de calibre não-Abeliana. Na Ref. [10] A. Zee analisa a estrutura de calibre não-Abeliana em ressonância nuclear quadrupolar.

Y. Aharonov e J. Anandan [11] propuseram uma forma mais geral para a fase geométrica de Berry chamada de fase Aharonov-Anandan, removendo a condição adiabática de qualquer evolução cíclica de um sistema quântico. Joseph Samuel e Rajendra Bhandari [12] deram outro passo importante na teoria aplicando a fase geométrica de Berry a evoluções não cíclicas e não unitárias de sistemas quânticos, baseados no trabalho de Pancharatman [13] sobre interferência de luz polarizada. Na Ref. [14] J. Anandan estende a teoria à fases geométricas não-adiabáticas e não-Abelianas.

Uma interessante abordagem pedagógica da fase de Berry é feita por Barry R. Holstein [15]. Nesta referência Holstein trata o clássico exemplo de uma partícula de spin 1/2 sujeita a um campo magnético externo. Ele também faz um comentário a respeito dos efeitos de interferência produzidos pela diferença entre fases geométricas bem como a interessante consequência da fase de Berry permitir de forma simples a compreensão do argumento de P.A.M. Dirac [16] da quantização da carga elétrica em função da carga do monopolo

magnético. Estudos das fases geométricas em sistemas quânticos dados como uma mistura estatística de estados quando abordados via matriz densidade, podem ser encontradas nas Ref. [17–22].

De acordo com os autores L.G. Yang *et al* [23], "*fases geométricas foram propostas como mecanismos típicos de sistemas quânticos para preservar a memória de suas evoluções no espaço de Hilbert*". A proposta deste capítulo é fazer uma breve revisão da teoria usualmente empregada no tratamento da fase geométrica de Berry, expondo algumas de suas propriedades tal como fez M.V. Berry ao empregar o formalismo diferencial por meio da representação de Schrödinger, ao tratá-la em seu artigo [2].

2.1.1 Formulação matemática

Considere inicialmente dois subsistemas que interagem entre si de forma fenomenológica via um conjunto de parâmetros chamados de *campos clássicos* $\vec{\mathbf{R}}(t)$. Esses parâmetros são funções reais, vistos como coordenadas tridimensionais do espaço de parâmetros \mathcal{M} , que traduzem uma espécie de acoplamento entre o subsistema em estudo e, nas palavras do próprio M.V. Berry, o "resto do universo" [2] (o outro subsistema). Dessa forma, ao sujeitar o sistema estudado a uma evolução adiabática cíclica, o operador Hamiltoniano $\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t))$ que depende parametricamente dos campos clássicos, se modificará numa escala de tempo com período característico T . Fenômenos quânticos associados a transições eletrônicas ocorrerão num intervalo de tempo comparativamente muito menor, com um período característico τ , isto é $\tau \ll T$. Em sistemas verdadeiramente isolados, a fase de Berry não se manifesta e portanto, efeitos observáveis surgirão apenas na forma familiar, como valores próprios de algum operador Hermitiano.

Dessa forma, supondo que o espectro de $\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t))$ seja discreto para todo $\vec{\mathbf{R}}(t) \in \mathcal{M}$, com autovalores de energia $E_n(\vec{\mathbf{R}}(t))$ não degenerados, a dinâmica do sistema quântico é dada pela equação de Schrödinger:

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

em que o vetor $|\psi(t)\rangle$ representa o estado do sistema. Devido à dependência temporal do operador Hamiltoniano $\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t))$, para cada instante existirá um conjunto completo de autoestados $\{|\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle\}$, sendo válidas as seguintes relações,

- Relação de completeza

$$\sum_n |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)| = \mathbf{1} , \quad (2.2)$$

sendo $\mathbf{1}$ o operador unitário, e o operador de projeção sobre cada autosubespaço- n sendo definido por:

$$\mathbf{P}_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) \equiv |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)| . \quad (2.3)$$

- Relação de ortonormalidade

$$\langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle = \delta_{n,m}, \quad (2.4)$$

onde a delta de Kroneker $\delta_{n,m}$ é definida por,

$$\delta_{n,m} \equiv \begin{cases} 1 & \text{se } n = m \\ 0 & \text{se } n \neq m. \end{cases} \quad (2.5)$$

Para cada instante, o operador Hamiltoniano revela um espectro de energia (não degenerado), tal como pode ser verificado por meio da equação de autovalor

$$\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle = E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle. \quad (2.6)$$

A solução geral da Eq. (2.1), em um instante qualquer, pode ser expressa por

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) e^{i\theta_n(t)} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle, \quad (2.7)$$

com a condição de normalização dada por: $\sum_n |a_n(t)|^2 = 1$, para $n > 1$. O fator de fase dinâmico é definido por

$$\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(\vec{\mathbf{R}}(t')) dt', \quad (2.8)$$

usualmente conhecido por acompanhar a evolução temporal de qualquer estado estacionário e claramente dependente do intervalo de tempo necessário a esta evolução. Durante o processo de demonstração da fase geométrica, alguns autores [24–26], por questões didáticas, preferem explicitar o fator de fase dinâmica na solução geral. Porém, isso não afeta sua dedução, de tal modo que a solução geral também pode ser dada sob uma forma condensada, omitindo a dependência com o fator de fase dinâmica no próprio coeficiente, isto é

$$b_n(t) = a_n(t) e^{i\theta_n(t)}, \quad (2.9)$$

em que $b_n(0) = a_n(0)$ e assim, a Eq. (2.7) fica

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n b_n(t) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle. \quad (2.10)$$

Neste trabalho, empregaremos ambas as representações. Ao tomar a forma (2.10), encontraremos a representação matricial dada na Ref. [3], usada no tratamento das fases dinâmica, adiabática e não-adiabática de um sistema expresso como uma superposição de autoestados. Com a forma (2.7), seguiremos incrementando de maneira sequencial os passos

dados nas Refs. [24–26]. Partindo dessa condição, substitui-se a Eq. (2.7) na Eq. (2.1) obtendo

$$i\hbar \sum_n \left[\dot{a}_n(t) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle + i\dot{\theta}_n(t) a_n(t) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle + a_n(t) \frac{d}{dt} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \right] e^{i\theta_n(t)} = \sum_n E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) a_n(t) e^{i\theta_n(t)} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle, \quad (2.11)$$

identificando o valor da derivada temporal do fator de fase dinâmica $\theta_n(t)$ por

$$\dot{\theta}_n(t) = -\frac{1}{\hbar} E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)), \quad (2.12)$$

e empregando-o na Eq. (2.11), com as devidas simplificações matemáticas, encontra-se

$$\sum_n \dot{a}_n(t) e^{i\theta_n(t)} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle = - \sum_n a_n(t) e^{i\theta_n(t)} \frac{d}{dt} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle. \quad (2.13)$$

Fazendo o produto interno dos dois lados da Eq. (2.13) com o vetor $\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)|$,

$$\sum_n \dot{a}_n(t) e^{i\theta_n(t)} \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle = - \sum_n a_n(t) \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \left(\frac{d}{dt} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \right), \quad (2.14)$$

observa-se no somatório que existem termos para os quais $m = n$ e também $m \neq n$, dessa forma, com o auxílio da definição (2.5), a equação que rege a dinâmica dos coeficientes $a_n(t)$ fica,

$$\dot{a}_m(t) = -a_m(t) \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \left(\frac{d}{dt} |\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \right) - \sum_{\substack{n, \\ n \neq m}} a_n(t) \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \left(\frac{d}{dt} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \right) e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))}. \quad (2.15)$$

As variações no tempo dos autoestados de energia estão associados à mudanças adiabáticas do operador Hamiltoniano, que é governada pelo conjunto de campos clássicos $\vec{\mathbf{R}}(t)$. Portanto, os coeficientes $\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \left(\frac{d}{dt} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \right)$ do lado direito da equação (2.15) serão reescritos em termos da taxa de variação temporal do operador Hamiltoniano. Essa relação é encontrada tomando a derivada temporal da equação de autovalor (2.6),

$$\frac{d}{dt} \left(\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \right) = \frac{d}{dt} \left(E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \right), \quad (2.16)$$

levando a

$$\left(\dot{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle + \mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t)) \left(\frac{d}{dt} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \right) \right) = \left(\dot{E}_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle + E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) \left(\frac{d}{dt} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \right) \right). \quad (2.17)$$

Projetando ambos os lados da equação (2.17) sobre o vetor $\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)|$, como também, utilizando a definição (2.5) e explorando a condição de hermiticidade do operador Hamiltoniano,

$\mathbf{H}^\dagger(\vec{\mathbf{R}}(t)) = \mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t))$, verificamos que

$$\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \left(\frac{d}{dt} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle \right) = \frac{\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \dot{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{R}}(t)) | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle}{(E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) - E_m(\vec{\mathbf{R}}(t)))} \quad (m \neq n). \quad (2.18)$$

Reescrevendo a equação (2.15) em função desse resultado, encontra-se um conjunto de equações diferenciais acopladas para os coeficientes $a_m(t)$,

$$\begin{aligned} \dot{a}_m(t) = & -a_m(t) \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \left(\frac{d}{dt} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle \right) - \\ & - \sum_{\substack{n, \\ n \neq m}} a_n(t) \frac{\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \dot{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{R}}(t)) | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle}{(E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) - E_m(\vec{\mathbf{R}}(t)))} e^{-i(\theta_m(t) - \theta_n(t))}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

A segunda parcela da Eq. (2.19) demonstra que, com o passar do tempo, estados com $m \neq n$ se acoplarão devido a dependência temporal de $\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t))$. De acordo com o Teorema Adiabático (ver capítulo (3), seção (3.1)), no limite $T \rightarrow \infty$ os termos do somatório para os quais ($n \neq m$), podem ser desprezados em relação aos termos $\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \left(\frac{d}{dt} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle \right)$, reduzindo a Eq. (2.19) a uma equação diferencial desacoplada:

$$\dot{a}_m(t) = -a_m(t) \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \left(\frac{d}{dt} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle \right), \quad (2.20)$$

cuja solução geral é

$$a_m(t) = a_m(0) e^{i\gamma_m(t)}, \quad (2.21)$$

com os coeficientes $a_m(0)$ sendo determinados por condições iniciais. O fator de fase $\gamma_m(t)$ é então definido por

$$\gamma_m(t) \equiv i \int_0^t \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t') | \left(\frac{d}{dt'} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t') \rangle \right) dt', \quad (2.22)$$

e designado por fase geométrica adiabática. Dessa forma, o vetor de estado que descreve o sistema em (2.7) pode agora ser reescrito de forma mais conveniente (para $m = n$),

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(0) e^{i(\gamma_n(t) + \theta_n(t))} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle. \quad (2.23)$$

Ao projetar o vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ sobre o vetor $\langle \vec{\mathbf{x}} |$ do espaço das coordenadas de posição, o sistema será representado por uma função de onda,

$$\psi(\vec{\mathbf{x}}, t) = \sum_n a_n(0) e^{i(\gamma_n(t) + \theta_n(t))} \varphi_n(\vec{\mathbf{x}}, t). \quad (2.24)$$

Em 1988, Samuel e Bhandari [12] generalizaram o conceito de fases geométricas a evoluções não-cíclicas, despertando o interesse de muitos autores teóricos [27–32] e experimentais [33] na investigação dessa nova abordagem.

Na Ref. [32], os autores mostram que a diferença entre fases geométricas adiabáticas

devem ser levadas em consideração uma vez que, efeitos de interferências são produzidos quando calculados os valores médios de certas quantidades físicas em estados que são uma superposição de autoestados instantâneos de energia. A linearidade da equação de Schrödinger permite escrever a evolução de um estado arbitrário como uma superposição linear dos autoestados com amplitudes cujas magnitudes e fases são como prescritas até o momento. Em geral, diferentes autoestados de energia adquirem diferentes fases geométricas e durante o cálculo dessas quantidades físicas, efeitos de interferência podem ser experimentalmente medidos, demonstrando uma importante forma de checar a linearidade de sistemas quânticos [4]. Uma dessas quantidades físicas é a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula entre as posições \vec{x} e $\vec{x} + d\vec{x}$ em um instante qualquer:

$$|\psi(\vec{x}; t)|^2 = \sum_n |a_n|^2 |\varphi_n(\vec{x}; t)|^2 + \sum_{\substack{n,l \\ n \neq l}} a_n a_l^* e^{i[\gamma_n(t) - \gamma_l(t)]} e^{it[\langle E_n(t) \rangle - \langle E_l(t) \rangle]} \varphi_n(\vec{x}; t) \varphi_l^*(\vec{x}; t), \quad (2.25)$$

em que $\psi(\vec{x}; t) = \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle$ e $\varphi_n(\vec{x}; t) = \langle \vec{x} | \varphi_n(t) \rangle$, e sendo $\langle E_n(t) \rangle$ a energia média durante o intervalo de tempo t definida por:

$$\langle E_n(t) \rangle \equiv -\frac{1}{t\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'. \quad (2.26)$$

Outra quantidade física relevante é o valor esperado de um operador Hermitiano O associado a um observável o ,

$$\begin{aligned} \langle O \rangle_t &= \langle \psi(t) | O | \psi(t) \rangle \\ &= \sum_n |a_n|^2 \langle \varphi_n; t | O | \varphi_n; t \rangle + \sum_{\substack{n,l \\ n \neq l}} a_n a_l^* e^{i[\gamma_n(t) - \gamma_l(t)]} e^{it[\langle E_n(t) \rangle - \langle E_l(t) \rangle]} \langle \varphi_n; t | O | \varphi_l; t \rangle. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Os efeitos de interferência são produzidos entre os termos da segunda parcela do lado direito de ambas equações, (2.25) e (2.27), e claramente dependem da diferença entre as fases geométricas.

Na Ref. [32] os autores também comentam que esses efeitos de interferência se mostram como uma característica fundamental da linearidade da mecânica quântica.

No instante inicial, $t = 0$, o vetor de estado fica

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n a_n(0) |\varphi_n; \vec{R}(0)\rangle; \quad (2.28)$$

ao impor a condição $a_n(0) = \delta_{n,m}$, este mesmo vetor de estado passa a ser

$$|\psi(0)\rangle = |\varphi_m; \vec{R}(0)\rangle, \quad (2.29)$$

e sua respectiva evolução temporal, dadas as condições adiabáticas, torna-se

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\gamma_m(t)} e^{i\theta_m(t)} |\varphi_m; \vec{R}(t)\rangle. \quad (2.30)$$

O vetor de estado $|\psi(t)\rangle$, na Eq. (2.30), é um dos resultados encontrados por Berry na Ref. [2]. Isso vem do fato de que quando um sistema quântico é preparado inicialmente no m -ésimo autoestado do Hamiltoniano $\mathbf{H}(0)$, isto é, $|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(0)\rangle$, após evoluir adiabaticamente, o sistema será encontrado no m -ésimo autoestado do Hamiltoniano $\mathbf{H}(t)$, $|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle$, acompanhado por um fator de fase extra, um registro de sua evolução no espaço de parâmetros. A natureza do integrando da fase de Berry pode ser investigada, uma vez considerada a condição de norma unitária dos autoestados instantâneos,

$$\langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle = 1.$$

De sua derivada total em relação ao tempo,

$$\frac{d}{dt} \left(\langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle \right) = 0,$$

fica,

$$\left(\frac{d}{dt} \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle \right) = - \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) | \left(\frac{d}{dt} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \right). \quad (2.31)$$

Observando que

$$\left(\left(\frac{d}{dt} \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle \right) \right)^* = \left(\langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) | \left(\frac{d}{dt} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \right) \right)^*, \quad (2.32)$$

nota-se que,

$$\Re \left(\langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) | \left(\frac{d}{dt} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \right) \right) = 0. \quad (2.33)$$

Verifica-se desse modo que o integrando da Eq.(2.22) é um número imaginário puro, e assim, conclui-se que $\gamma_m(t)$ é uma função real.

Como a dependência temporal dos autoestados instantaneos $|\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle$ se faz através dos campos clássicos, isso nos permite fazer

$$\frac{d}{dt} |\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle = \sum_i \frac{\partial}{\partial R_i} |\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}\rangle \frac{dR_i}{dt}, \quad (2.34)$$

$$= (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} |\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}\rangle) \cdot \frac{d\vec{\mathbf{R}}}{dt}, \quad (2.35)$$

e o integrando da fase $\gamma_m(t)$, na equação (2.22), pode agora ser expresso como:

$$\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t') | \left(\frac{d}{dt'} |\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t')\rangle \right) dt' = \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} | (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} |\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}\rangle) \cdot d\vec{\mathbf{R}}, \quad (2.36)$$

e assim, $\gamma_m(t)$ pode ser escrita como uma integral de linha ao longo de uma curva suave C no espaço \mathcal{M} ,

$$\gamma_m(C) = i \int_C \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} | (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} |\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}\rangle) \cdot d\vec{\mathbf{R}}, \quad (2.37)$$

com C representando o caminho percorrido pelos campos clássicos desde o instante $t_0 = 0$ até o instante t qualquer. Para $\vec{\mathbf{R}}(t) \in \mathcal{M}$, tem-se para o operador diferencial nabla $\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}}$ a seguinte definição:

$$\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \equiv \left[\frac{\partial}{\partial X} \hat{e}_i + \frac{\partial}{\partial Y} \hat{e}_j + \frac{\partial}{\partial Z} \hat{e}_k \right], \quad (2.38)$$

onde foi empregada a convenção: $\vec{\mathbf{R}}(t) = X(t) \hat{e}_i + Y(t) \hat{e}_j + Z(t) \hat{e}_k$.

No caso particular de uma evolução cíclica $C \rightarrow C$, em que $\vec{\mathbf{R}}(0) = \vec{\mathbf{R}}(T)$ e que no domínio ao qual $\vec{\mathbf{R}}(t)$ pertence não exista nenhuma singularidade, a fase (2.22) passa a ser chamada de fase geométrica de Berry ou fase de Berry¹ manifestando-se tanto em sistemas fermiônicos quanto bosônicos [2], assumindo a forma

$$\gamma_m(C) = i \oint_C \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} | (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}) \rangle \cdot d\vec{\mathbf{R}}. \quad (2.39)$$

Apesar de retornar ao ponto de partida, ao longo de um circuito fechado C no espaço \mathcal{M} , geralmente a fase de Berry é diferente de zero ($\gamma_m(0) \neq \gamma_m(T)$) [24].

Desde a publicação da Ref. [2], o estudo da fase de Berry tem sido abordada em muitos campos da física [34–43]. Numerosas verificações experimentais também foram realizadas [44–47] logo após a descoberta de sua importância. Em estudos recentes, foi proposta como um protótipo para o bit quântico (qubit) [48–52]. Na Ref. [53], os autores Gu Zhi-Yu e QIAN Shang-Wu discutem a definição e a relação entre a fase de Berry e outros tipos de fase como a Aharonov-Anandan.

Como feito anteriormente em (2.32), a normalização de $|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}\rangle$ implica que $\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} | (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}) \rangle$ seja imaginário puro garantindo que $\gamma_m(C)$ permaneça uma função real. Como o vetor de estado descreve um circuito fechado C no espaço de parâmetros \mathcal{M} , a integral de linha pode ser escrita como uma integral de superfície \mathcal{S} com o uso do Teorema de Stokes,²

$$\gamma_m(C) = \iint_{\mathcal{S}} \vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \times \left[i \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} | (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}) \rangle \right] \cdot \hat{e}_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) ds, \quad (2.40)$$

sendo \mathcal{S} uma superfície aberta com elemento de área $d\vec{S}(\vec{\mathbf{R}}(t)) = \hat{e}_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) ds$, delimitada pela curva C , com vetor unitário $\hat{e}_n(\vec{\mathbf{R}}(t))$ perpendicular a \mathcal{S} com sentido dado pela regra da mão direita [54].

Definindo agora a chamada conexão de Berry como³

$$\vec{\mathbf{A}}_m(\vec{\mathbf{R}}) \equiv i \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} | (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}) \rangle, \quad (2.41)$$

¹Apesar da fase acumulada por sistemas quânticos que viajam adiabaticamente ao longo de uma trajetória fechada ser chamada de fase de Berry, o próprio Berry se referia a ela simplesmente por fase geométrica [25].

²Na Ref. [25] o autor utiliza o teorema de Stokes, porém faz uma ressalva afirmando que o mesmo não é trivial quando aplicado a dimensões mais altas. Um breve comentário também é feito no artigo de M.V.Berry [2].

³A quantidade $\vec{\mathbf{A}}_m(\vec{\mathbf{R}})$ também é conhecida por outras denominações como: *potencial vetor de Berry*, *potencial vetor geométrico*, e *potencial molecular Aharonov-Bohm* [55].

uma grandeza real que por sua vez, surge para descrever como relacionar ou conectar os estados $|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}\rangle$ e $|\varphi_m; \vec{\mathbf{R}} + d\vec{\mathbf{R}}\rangle$ associados a dois pontos próximos no espaço de parâmetros [55]. Utilizando a definição (2.41) juntamente com o Teorema de Stokes, a fase $\gamma_m(C)$ fica

$$\gamma_m(C) = \oint_C \vec{\mathbf{A}}_m(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} = \iint_S (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \times \vec{\mathbf{A}}_m(\vec{\mathbf{R}})) \cdot \hat{\mathbf{e}}_n(\vec{\mathbf{R}}) ds. \quad (2.42)$$

A fase de Berry depende da geometria do circuito C traçado no espaço \mathcal{M} - daí o nome fase geométrica, mas não da velocidade para percorre-lo (uma vez considerada a aproximação adiabática).

A fase $\gamma_m(C)$ é vista como uma não-holonomia associada a conexão $\vec{\mathbf{A}}_m(\vec{\mathbf{R}})$. Ao fazer uma analogia com a geometria esférica, o transporte paralelo de um vetor ao longo de um triângulo geodésico sobre a superfície da Terra, não devolve sua forma original. O deslocamento angular entre as direções inicial e final, é a não-holonomia associada a conexão definida pelo transporte paralelo [55].

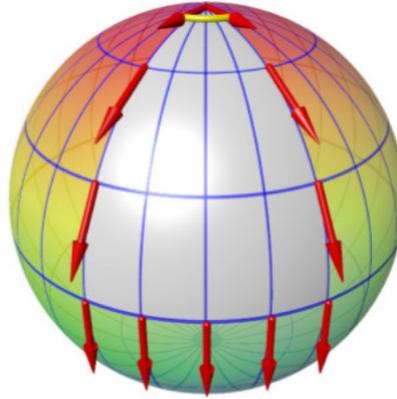


Figura 2.1. Transporte paralelo de um vetor ao longo de uma curva geodésica fechada sobre a superfície esférica [56].

Como representado na figura (2.1), embora o sistema retorne a sua posição inicial ele adquire uma fase geométrica caracterizada pela mudança entre as direções do vetor, antes e após o transporte paralelo.

Na Ref. [57], os autores Jens von Bergmann e HsingChi von Bergmann fornecem uma explicação completa sobre o pêndulo de Foucault e o processo de transporte paralelo sobre superfícies curvas, se utilizando para isto de argumentos geométricos básicos. Além disso, explicam também como o pêndulo de Foucault pode ser visto como um protótipo de uma ampla gama de fenômenos em vários ramos da física.

A descrição local das propriedades geométricas do espaço de parâmetros é dada pela chamada curvatura de Berry, uma grandeza real definida como [26]:

$$\vec{\mathbf{V}}_m(\vec{\mathbf{R}}) \equiv \vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \times \vec{\mathbf{A}}_m(\vec{\mathbf{R}}), \quad (2.43)$$

ou ainda, na forma tensorial [26]

$$\mathbf{V}_{\mu\nu}^m(\vec{\mathbf{R}}) = \frac{\partial}{\partial R^\mu} \mathbf{A}_\nu^m(\vec{\mathbf{R}}) - \frac{\partial}{\partial R_\nu} \mathbf{A}_\mu^m(\vec{\mathbf{R}}). \quad (2.44)$$

Podemos então, escrever $\gamma_m(C)$ como

$$\gamma_m(C) = \iint_S \vec{\mathbf{V}}_m(\vec{\mathbf{R}}) \cdot \hat{\mathbf{e}}_n(\vec{\mathbf{R}}) ds, \quad (2.45)$$

e assim, interpretá-la como o fluxo de $\vec{\mathbf{V}}_m(\vec{\mathbf{R}})$ sobre a superfície S delimitada pela curva C . Isso nos permite notar que a dimensão de $\vec{\mathbf{V}}_m(\vec{\mathbf{R}})$ é $[R]^{-2}$, onde $[R]$ é a dimensão de $\vec{\mathbf{R}}$. Escrevendo $\vec{\mathbf{V}}_m(\vec{\mathbf{R}})$ como,

$$\vec{\mathbf{V}}_m(\vec{\mathbf{R}}) = i \left((\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} |) \times (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} \rangle) \right), \quad (2.46)$$

tem-se a primeira forma de $\vec{\mathbf{V}}_m(\vec{\mathbf{R}})$ [55].

Inserindo nessa expressão, um conjunto completo de autoestados instantâneos $\{|\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}\rangle\}$, encontramos

$$\vec{\mathbf{V}}_m(\vec{\mathbf{R}}) = i \sum_{\substack{n, \\ n \neq m}} \left((\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} |) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}\rangle \times \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} \rangle) \right). \quad (2.47)$$

O produto vetorial em (2.47) envolvendo os termos $n = m$, são nulos [25], pois $\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} \rangle = 1$, o que implica em $(\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} |) |\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}\rangle = - \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} | (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} \rangle)$.

De forma análoga ao que foi feito em (2.16), aplica-se o operador $\nabla_{\vec{\mathbf{R}}}$ na equação de autovalor (2.6),

$$\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \left(\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \right) = \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \left(E_m(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \right), \quad (2.48)$$

a fim de encontrar o termo,

$$\langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} \rangle) = \frac{\langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}) | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} \rangle}{(E_m(\vec{\mathbf{R}}) - E_n(\vec{\mathbf{R}}))}, \quad (2.49)$$

substituindo-o nos termos entre parênteses da Eq. (2.47) e assim, obtendo

$$\begin{aligned} \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} | (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} \rangle) \times \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} \rangle) &= \frac{\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}) | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} \rangle}{(E_n(\vec{\mathbf{R}}) - E_m(\vec{\mathbf{R}}))} \times \frac{\langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}) | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} \rangle}{(E_n(\vec{\mathbf{R}}) - E_m(\vec{\mathbf{R}}))} \\ &= \left(\frac{\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \mathbf{H} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} \rangle \times \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \mathbf{H} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} \rangle}{(E_n(\vec{\mathbf{R}}) - E_m(\vec{\mathbf{R}}))^2} \right). \end{aligned} \quad (2.50)$$

Com isso, $\vec{\mathbf{V}}_m(\vec{\mathbf{R}})$ assume a sua segunda forma [55]:

$$\mathbf{V}_m(\vec{\mathbf{R}}) = i \sum_{\substack{n, \\ n \neq m}} \left(\frac{\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \mathbf{H} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} \rangle \times \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \mathbf{H} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}} \rangle}{(E_n(\vec{\mathbf{R}}) - E_m(\vec{\mathbf{R}}))^2} \right). \quad (2.51)$$

Na Ref. [55], o autor faz o seguinte questionamento: "Se pensarmos em \vec{V}_m como um campo magnético, quais são as fontes desse campo?". Ele ainda ressalta que uma vez considerada a Eq. (2.43), tem-se que $\vec{V} \cdot \vec{V}_m(\vec{R}) = 0$, tal como um verdadeiro campo magnético, de modo que as fontes que o produzem devem ter um significado físico.

A Eq. (2.51), mostra que $\vec{V}_m(\vec{R})$ é singular em pontos de degenerescência no espaço de parâmetros onde os denominadores de energia são nulos, mesmo os elementos de matriz não-diagonais de $\vec{V}H(\vec{R})$ geralmente não sendo nulos nesses mesmos pontos [55]. Esses pontos, comportam-se como cargas⁴ (monopolos) magnéticas, fontes de campo magnético \vec{B} . Uma vez que $\vec{V}_{\vec{R}} \times \vec{B} \neq 0$, essas cargas podem não ser as únicas fontes de campo, podendo haver correntes que fluem através do espaço de parâmetros [55]. As equações (2.45) e (2.51) expressam os resultados centrais do artigo de M.V. Berry [2].

Uma vez que, a aproximação adiabática é essencialmente uma operação de projeção, a dinâmica do sistema estará restrita ao m -ésimo nível de energia. Dessa forma, os autores da Ref. [26] argumentam que a Eq. (2.51) pode ser interpretada como o resultado da interação residual entre os níveis de energia associados as projeções sobre seus respectivos autosubespaços. A lei da conservação local da curvatura de Berry diz que :

$$\sum_m \vec{V}_m(\vec{R}) = 0. \quad (2.52)$$

Essa igualdade pode ser verificada ao considerarmos o clássico modelo do sistema de dois níveis, proposto inicialmente por Berry [2], em que uma partícula de spin semi-inteiro está sujeita a um campo magnético externo dependente do tempo. Nas várias Rfs. [15, 25, 26, 55] que abordam esse sistema, os autores encontram ao menos um dos termos de curvatura associados a cada autoestado, *up* e/ou *down* (projeções de momento de dipolo magnético de spin na direção do eixo z) que, quando somados, nos fornecem o resultado da Eq. (2.52).

2.1.2 O número de Chern e a denominação do termo curvatura de Berry

Na Ref. [55], o autor Anupam Garg faz um estudo da fase de Berry com ênfase no conceito de curvatura de Berry e o chamado número de Chern. Ele analisa e discute o comportamento dessas quantidades, bem como as propriedades de funções de onda adiabaticamente contínuas nas vizinhanças de degenerescências.

Garg emprega uma analogia com superfícies curvas a fim de justificar o termo curvatura. Ele considera um ponto arbitrário sobre uma superfície qualquer no espaço euclidiano tridimensional e fixa a origem do sistema coordenado nesse mesmo ponto, com o vetor normal (\hat{e}_n) alinhado ao eixo z . Além disso, ele determina que os eixos x e y estejam alinhados com as direções das chamadas curvaturas principais e diz que próximo à origem, a equação da

⁴Se uma sucessão de pontos de degenerescência se dispuserem como uma corda no espaço de parâmetros, então, tem-se a chamada Corda de Dirac [55].

superfície é dada por [55]

$$z = -\frac{1}{2}(\kappa_1 x^2 + \kappa_2 y^2), \quad (2.53)$$

onde κ_1 e κ_2 são as curvaturas principais. A curvatura gaussiana ou curvatura de Gauss, \mathcal{K} , sobre a superfície no ponto em questão é

$$\mathcal{K} = \kappa_1 \kappa_2. \quad (2.54)$$

Para qualquer x e y pequenos, o vetor normal a superfície pode ser dado por

$$\hat{e}_n = \hat{e}_k + \kappa_1 x \hat{e}_i + \kappa_2 y \hat{e}_j, \quad (2.55)$$

e portanto, ao tomarmos a derivada do vetor normal, \hat{e}_n , em relação as coordenadas x e y , encontramos

$$\frac{\partial \hat{e}_n}{\partial x} = \kappa_1 \hat{e}_i \quad (2.56)$$

e

$$\frac{\partial \hat{e}_n}{\partial y} = \kappa_2 \hat{e}_j. \quad (2.57)$$

Efetuando o produto vetorial das derivadas sobre cada eixo, teremos

$$\frac{\partial \hat{e}_n}{\partial x} \times \frac{\partial \hat{e}_n}{\partial y} = \mathcal{K} \hat{e}_k. \quad (2.58)$$

Fazendo uma comparação entre as equações (2.46) e (2.58), verifica-se uma semelhança na forma do produto vetorial entre as diferenciais⁵ e com essa analogia simples, Garg explica o motivo do termo $\vec{\nabla}_m$ ser chamado de curvatura de Berry.

O Teorema de Gauss-Bonnet diz que a integral da curvatura de Gauss sobre qualquer superfície fechada é igual a 2π vezes a característica de Euler, χ ,⁶ daquela superfície. Este por sua vez, depende apenas da topologia da superfície, como por exemplo: $\chi = 2$ para uma esfera, $\chi = 0$ para um toro [55]. Uma discussão atraente sobre esse teorema pode ser encontrada na Ref. [58].

Garg diz ainda que o análogo topológico da característica de Euler é o chamado número de Chern, aqui definido por

$$Q_n = \frac{1}{2\pi} \oint_S \vec{\nabla}_n(\vec{\mathbf{R}}) \cdot \hat{e}_n ds, \quad (2.59)$$

para qualquer n (isto é, para qualquer autoestado instantâneo) e para qualquer superfície S . Nas Refs. [15] e [25] os autores comentam um pouco mais a respeito da Eq (2.59). Eles consideram duas superfícies \mathcal{S}_1 e \mathcal{S}_2 no espaço \mathcal{M} , cada uma delas limitada pela mesma curva C . Sendo a fase de Berry (encontrada ao percorrermos a curva C) um resultado físico,

⁵De acordo com Garg, na linguagem da geometria diferencial e cálculo exterior, a semelhança se torna ainda mais evidente, uma vez que os conceitos vetoriais de cálculo de gradiente, rotacional e divergente são generalizados a dimensões mais altas [55].

⁶A característica de Euler é um invariante topológico (um número) que descreve a forma ou estrutura de um espaço topológico independente da forma que ela é dobrada [58].

a integral de superfície (2.45) deve ser a mesma para S_1 e S_2 a menos de um múltiplo de 2π . Isto é

$$\int_{S_1} \vec{V}_n(\vec{R}) \cdot \hat{e}_{n_1} ds_1 = \int_{S_2} \vec{V}_n(\vec{R}) \cdot \hat{e}_{n_2} ds_2 + 2\pi Q_n, \quad Q_n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.60)$$

Agora, eles sugerem a construção de uma superfície fechada colocando S_1 "acima" de C e S_2 abaixo. E empregam a técnica da mão direita [54] como recurso prático para definir consistentemente a orientação do vetor normal, \hat{e}_n , para cada uma das integrais da Eq. (2.60), sendo que para um deles $\hat{e}_{n_1} = -\hat{e}_{n_2}$ (ou vice-versa), encontrando por fim

$$2\pi Q_n = \oint_S \vec{V}_n(\vec{R}) \cdot \hat{e}_n ds. \quad (2.61)$$

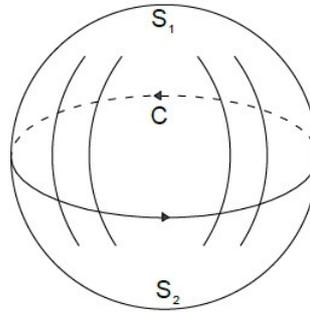


Figura 2.2. Ao integrar mais de uma superfície delimitada por uma curva de C , como mostrado, tem-se a opção de usar as superfícies S_1 e S_2 , a fim de calcular o fluxo em questão - adaptado da Ref. [15].

2.2 Comportamento da fase de Berry sob mudança de base

Um sistema quântico pode ser representado matematicamente por um vetor de estado escrito como combinação linear dos autoestados de energia do operador Hamiltoniano. No entanto, uma certa base de autoestados pode não ser a única a representar de forma consistente esse mesmo estado quântico. Para verificar como as fases $\gamma_m(t)$ se modificam mediante uma mudança de base, é escolhido um novo conjunto de autoestados $\{|\Phi_n; \vec{R}(t)\rangle\}$ (não degenerados) do operador Hamiltoniano $H(\vec{R}(t))$, tal que [4, 32]

$$|\Phi_n; \vec{R}(t)\rangle = e^{i\alpha_n(t)} |\varphi_n; \vec{R}(t)\rangle, \quad (2.62)$$

sendo $\alpha_n(t)$ uma função real bem comportada. Sua dependência temporal pode ser tanto explícita ou implícita, manifestando-se por meio dos campos clássicos $\vec{R}(t)$. As relações de completude e ortonormalidade continuam válidas para a nova base de autoestados instantâneos $\{|\Phi_n; \vec{R}(t)\rangle\}$,

$$\sum_n |\Phi_n; \vec{R}(t)\rangle \langle \Phi_n; \vec{R}(t)| = \mathbf{1}, \quad \text{completude} \quad (2.63)$$

e

$$\langle \Phi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \Phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle = \delta_{m,n} , \quad \text{ortonormalidade} \quad (2.64)$$

e equação de autovalor instantânea

$$\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t)) | \Phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle = E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) | \Phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle . \quad (2.65)$$

O estado inicial em (2.28) nessa base fica:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0) | \Phi_n; \vec{\mathbf{R}}(0) \rangle , \quad (2.66)$$

sendo,

$$| \Phi_n; \vec{\mathbf{R}}(0) \rangle = e^{i\alpha_n(0)} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(0) \rangle , \quad (2.67)$$

e ao compararmos as equações (2.28) e (2.66), estabelecemos a relação entre os coeficientes no instante inicial ($t = 0$)

$$c_n(0) = a_n(0) e^{-i\alpha_n(0)} . \quad (2.68)$$

Em um instante qualquer, o estado do sistema escrito nessa nova base é

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} | \Phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle , \quad (2.69)$$

semelhante a Eq. (2.7). Portanto, de forma análoga aos procedimentos empregados para encontrar $\gamma_n(t)$ (na base $\{|\varphi_n, \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle\}$), tomando a Eq. (2.69) na equação de Schrödinger encontram-se os coeficientes $c_n(t)$,

$$c_n(t) = c_n(0) e^{i\lambda_n(t)} , \quad (2.70)$$

onde a fase $\lambda_n(t)$, semelhante a definição (2.22), é formada por

$$\lambda_n(t) = i \int_0^t \langle \Phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t') | \left(\frac{d}{dt'} | \Phi_n; \vec{\mathbf{R}}(t') \rangle \right) dt' , \quad (2.71)$$

$$= \int_0^t \left(-\dot{\alpha}_n(t') + i \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t') | \left(\frac{d}{dt'} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t') \rangle \right) \right) dt' , \quad (2.72)$$

$$= \alpha_n(0) - \alpha_n(t) + \gamma_n(t) . \quad (2.73)$$

Para uma dependência temporal implícita, isto é, através dos campos clássicos, a derivada temporal de $\alpha_n(\vec{\mathbf{R}}(t))$ é,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \alpha_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) &= \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{R}}} \alpha_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) \frac{d}{dt} \vec{\mathbf{R}}(t) , \\ &= \left[\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \alpha_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) \right] \cdot \dot{\vec{\mathbf{R}}} . \end{aligned} \quad (2.74)$$

Uma vez que,

$$\langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | \frac{d}{dt} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} \rangle = \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} \rangle) \cdot \dot{\vec{\mathbf{R}}}, \quad (2.75)$$

então, a Eq. (2.72) podera ser reescrita como,

$$\lambda_n(t) = \int_C \left(i \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} \rangle) - (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \alpha_n(\vec{\mathbf{R}})) \right) \cdot d\vec{\mathbf{R}}. \quad (2.76)$$

Chamando,

$$\vec{\mathbf{A}}_n^{(\alpha)}(\vec{\mathbf{R}}) \equiv i \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} \rangle) - (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \alpha_n(\vec{\mathbf{R}})), \quad (2.77)$$

uma vez que $\vec{\mathbf{A}}_n(\vec{\mathbf{R}}) = \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} \rangle)$, como definido na Eq. (2.41), logo a Eq. (2.77) fica

$$\vec{\mathbf{A}}_n^{(\alpha)}(\vec{\mathbf{R}}) = \vec{\mathbf{A}}_n(\vec{\mathbf{R}}) - (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \alpha_n(\vec{\mathbf{R}})). \quad (2.78)$$

A partir da Eq. (2.78), nota-se o surgimento de uma transformação de calibre Abelianas clássica na fase geométrica quando feita a mudança de base (Eq. (2.62)). A princípio, a liberdade de calibre parece ser um mecanismo apropriado quando empregado na remoção do fator de fase $e^{i\gamma_n(t)}$ do vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ na Eq. (2.30). Esta observação foi feita por Max Born e Vladimir Fock [59] ao estudarem evoluções adiabáticas em sistemas quânticos de espectro não-degenerado [60]. Eles concluíram que sempre seria possível escolher adequadamente uma função $\alpha_n(\vec{\mathbf{R}})$ na Eq. (2.76), anulando a fase $\lambda_n(t)$ acumulada ao longo de um percurso C . Isso se verifica ao fazer, num instante qualquer

$$\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \alpha_n(\vec{\mathbf{R}}) = i \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} \rangle). \quad (2.79)$$

Devido a isso, o fator de fase geométrica $\gamma_n(t)$ foi considerado de pouca importância e normalmente negligenciado no tratamento teórico de problemas dependentes do tempo [26]. A conclusão conjunta de M. Born e V. Fock permaneceu inscontestável até M.V. Berry [2]⁷ reconsiderar a evolução adiabática de um sistema quântico ao longo de um circuito fechado C onde, $\vec{\mathbf{R}}(0) = \vec{\mathbf{R}}(T)$.

Se o domínio de $\alpha_n(\vec{\mathbf{R}})$, no presente contexto, for $0 \leq \alpha_n \leq 2\pi$, então é necessário avaliar a unicidade dos autoestados em relação a este ângulo, o que significa que ao longo de uma evolução cíclica (uma curva C no espaço \mathcal{M}), ao retornarmos à posição inicial o autoestado apresentará o mesmo valor que tinha inicialmente. Dessa forma, podemos fazer a seguinte avaliação:

$$|\Phi_n; \vec{\mathbf{R}}(T)\rangle = e^{i\alpha_n(\vec{\mathbf{R}}(T))} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(T)\rangle, \quad (2.80)$$

$$= e^{i\alpha_n(\vec{\mathbf{R}}(0))} |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(0)\rangle, \quad (2.81)$$

⁷O autor, na Ref. [24] em uma nota de rodapé, diz ser surpreendente que esse resultado tenha passado despercebido por tanto tempo.

e constatar então que há uma restrição sobre $e^{i\alpha_n(\vec{\mathbf{R}}(T))} = e^{i\alpha_n(\vec{\mathbf{R}}(0))}$, para $|\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(0)\rangle = |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(T)\rangle$, que se traduz em [26]

$$\alpha_n(T) - \alpha_n(0) = 2\pi\eta, \quad (2.82)$$

com η inteiro. Dessa forma a Eq. (2.73), com evolução cíclica, fica

$$\lambda_n(T) = \gamma_n(T) - 2\pi\eta. \quad (2.83)$$

Isso mostra que γ_n modifica-se apenas por um múltiplo inteiro de 2π quando feita a mudança de base (2.62), não podendo então ser removida de $|\psi(t)\rangle$ na Eq. (2.30).

Podemos avaliar também, a partir da mudança de base proposta na Eq. (2.62), a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula entre as posições $\vec{\mathbf{x}}$ e $\vec{\mathbf{x}} + d\vec{\mathbf{x}}$ num instante qualquer (ver Eq. (2.25)), considerando para este fim a Eq. (2.73),

$$|\psi(\vec{\mathbf{x}}; t)|^2 = \sum_n |c_n|^2 |\Phi_n(\vec{\mathbf{x}}; t)|^2 + \sum_{\substack{n,l \\ n \neq l}} c_n c_l^* e^{i[\lambda_n(t) - \lambda_l(t)]} e^{it[\langle E_n(t) \rangle - \langle E_l(t) \rangle]} \Phi_n(\vec{\mathbf{x}}; t) \Phi_l^*(\vec{\mathbf{x}}; t). \quad (2.84)$$

Na primeira parcela da Eq. (2.84), com soma de índice n , os termos exponenciais serão eliminados em função do módulo ao quadrado. É necessário então focar a atenção na parcela onde se encontra a diferença entre as fases geométricas, e observar que

$$\begin{aligned} c_n c_l^* e^{i[\lambda_n(t) - \lambda_l(t)]} \Phi_n(\vec{\mathbf{x}}; t) \Phi_l^*(\vec{\mathbf{x}}; t) &= a_n e^{-i\alpha_n(0)} a_l^* e^{i\alpha_l(0)} e^{i[\gamma_n(t) - \alpha_n(t) + \alpha_n(0) - \gamma_l(t) + \alpha_l(t) - \alpha_l(0)]} \times \\ &\quad \times \varphi_n(\vec{\mathbf{x}}; t) e^{i\alpha_n(t)} \varphi_l^*(\vec{\mathbf{x}}; t) e^{-i\alpha_l(t)}, \\ &= a_n a_l^* e^{i[\gamma_n(t) - \gamma_l(t)]} \varphi_n(\vec{\mathbf{x}}; t) \varphi_l^*(\vec{\mathbf{x}}; t). \end{aligned} \quad (2.85)$$

Como a diferença entre as médias dos autovalores de energia é a mesma em ambas as bases, nos certificamos então que cada parcela do lado direito da Eq. (2.25) é independente da base de autoestados de energia empregada em seu cálculo. Analogamente, ao aplicar os mesmos procedimentos na avaliação do valor esperado de um operador Hermitiano \mathcal{O} associado a um observável o (ver Eq. (2.27)), verifica-se de igual maneira que seu cálculo é independente da base de autoestados de energia [32].

Em certas referências como [4, 15, 25], os autores empregam o Teorema de Stokes como forma alternativa de verificar o comportamento da fase de Berry mediante mudança de base, fazendo

$$\lambda_n(C) = \oint_C \vec{\mathbf{A}}_\alpha^{(n)}(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}}, \quad (2.86)$$

e verifica-se que,

$$\oint_C \vec{\mathbf{A}}_\alpha^{(n)}(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} = \iint_S (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \times \vec{\mathbf{A}}_\alpha^{(n)}(\vec{\mathbf{R}})) \cdot \hat{\mathbf{e}}_n(\vec{\mathbf{R}}) ds. \quad (2.87)$$

Com a definição feita na Eq. (2.77), a Eq. (2.87) fica

$$\oint_C \vec{\mathbf{A}}_\alpha^{(n)}(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} = \iint_S [\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \times (i \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | \vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} \rangle - \vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \alpha_n(\vec{\mathbf{R}}))] \cdot \hat{\mathbf{e}}_n(\vec{\mathbf{R}}) ds. \quad (2.88)$$

Para qualquer função $\alpha_n(\vec{\mathbf{R}})$ (bem comportada), tem-se que $[\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \times (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \alpha_n(\vec{\mathbf{R}}))] = 0$, e assim

$$\oint_C \vec{\mathbf{A}}_\alpha^{(n)}(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} = \iint_S [\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \times (i \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} \rangle))] \cdot \hat{\mathbf{e}}_n(\vec{\mathbf{R}}) ds, \quad (2.89)$$

portanto,

$$\oint_C \vec{\mathbf{A}}_\alpha^{(n)}(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} = \oint_C \vec{\mathbf{A}}_n(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}}. \quad (2.90)$$

A fase $\lambda_n(C)$ torna-se a própria fase de Berry $\gamma_n(C)$. É possível notar também, que mesmo a conexão de Berry $\vec{\mathbf{A}}_\alpha^{(n)}(\vec{\mathbf{R}})$ não sendo invariante, a curvatura de Berry $\vec{\mathbf{V}}_n(\vec{\mathbf{R}})$ é invariante, e portanto observável, uma vez que:

$$\vec{\mathbf{V}}_n(\vec{\mathbf{R}}(T)) = \vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \times \vec{\mathbf{A}}_\alpha^{(n)}(\vec{\mathbf{R}}(T)) \quad (2.91)$$

$$= \vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \times (\vec{\mathbf{A}}_n(\vec{\mathbf{R}}) - (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \alpha_n(\vec{\mathbf{R}}))) \quad (2.92)$$

$$= \vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \times \vec{\mathbf{A}}_n(\vec{\mathbf{R}}). \quad (2.93)$$

Da invariância de $\vec{\mathbf{V}}_n(\vec{\mathbf{R}})$ na Eq. (2.45), conclui-se que a fase de Berry adquirida pelos autoestados instantâneos de energia, após evolução cíclica no espaço de parâmetros é física (invariante por transformação de calibre) e independente da escolha de base empregada na descrição do vetor de estado em cada instante. A curvatura de Berry, $\vec{\mathbf{V}}_n(\vec{\mathbf{R}})$, pode ser interpretada como uma grandeza análoga ao campo magnético no espaço de parâmetros com a conexão de Berry, $i \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} | (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}} \rangle)$, no "papel" do potencial vetor.

Verificamos então que, para $C : \vec{\mathbf{R}}(0) \rightarrow \vec{\mathbf{R}}(t) \rightarrow \vec{\mathbf{R}}(T)$, uma evolução cíclica no espaço \mathcal{M} , a fase de Berry se manifestará em medidas feitas do sistema, não podendo ser eliminada por mudança de base.

2.3 Representação matricial

Na Ref. [3], os autores Wu Jin-Wei e Guo Guang-can, expuseram uma formulação matricial por meio da qual demonstram a contribuição de três tipos de fases: fase dinâmica, fase adiabática e fase não-adiabática, no tratamento de evoluções temporais de sistemas quânticos como o oscilador harmônico de massa variável e a evolução de estados coerentes. Para encontrar a forma matricial que discrimina essas contribuições, como proposto na Ref. [3], basta tomar a Eq. (2.9) em função dos coeficientes $a_n(t)$

$$a_n(t) = e^{-i\theta_n(t)} b_n(t), \quad (2.94)$$

e emprega-los na Eq. (2.15), ficando

$$e^{-i\theta_m(t)} \left(\dot{b}_m(t) + \frac{i}{\hbar} E_m(t) b_m(t) \right) = -b_m(t) e^{-i\theta_m(t)} \langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \left(\frac{d}{dt} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle \right) - \sum_{\substack{n, \\ n \neq m}} b_n(t) \frac{\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \dot{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{R}}(t)) | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle}{(E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) - E_m(\vec{\mathbf{R}}(t)))} e^{-i\theta_m(t)}. \quad (2.95)$$

Eliminando os termos de fase em comum e rearranjando a Eq. (2.95), encontramos

$$\dot{b}_m(t) = - \left(\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \frac{d}{dt} | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle + \frac{i}{\hbar} E_m(t) \right) b_m(t) - \sum_{\substack{n, \\ n \neq m}} b_n(t) \frac{\langle \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) | \dot{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{R}}(t)) | \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle}{(E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) - E_m(\vec{\mathbf{R}}(t)))}. \quad (2.96)$$

Para compor as matrizes que geram essas equações, basta considerar⁸

$$B(t) = \begin{pmatrix} b_1(t) \\ b_2(t) \\ \vdots \\ b_m(t) \end{pmatrix} \quad (2.97)$$

e também

$$D(t) = - \begin{pmatrix} \frac{iE_1}{\hbar} + \langle \varphi_1 | \dot{\varphi}_1 \rangle & \frac{\langle \varphi_1 | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_2 \rangle}{E_2 - E_1} & \frac{\langle \varphi_1 | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_3 \rangle}{E_3 - E_1} & \cdots & \frac{\langle \varphi_1 | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_m \rangle}{E_m - E_1} \\ \frac{\langle \varphi_2 | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_1 \rangle}{E_1 - E_2} & \frac{iE_2}{\hbar} + \langle \varphi_2 | \dot{\varphi}_2 \rangle & \frac{\langle \varphi_2 | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_3 \rangle}{E_3 - E_2} & \cdots & \frac{\langle \varphi_2 | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_m \rangle}{E_m - E_2} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\langle \varphi_m | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_1 \rangle}{E_1 - E_m} & \frac{\langle \varphi_m | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_2 \rangle}{E_2 - E_m} & \cdots & \frac{\langle \varphi_m | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_{m-1} \rangle}{E_{m-1} - E_m} & \frac{iE_m}{\hbar} + \langle \varphi_m | \dot{\varphi}_m \rangle \end{pmatrix} \quad (2.98)$$

e assim, a partir da Eq. (2.96) compomos a equação matricial

$$\dot{B}(t) = D(t)B(t), \quad (2.99)$$

cuja solução é

$$B(t) = B(0) \left[\exp \int_0^t D(t') dt' \right], \quad (2.100)$$

em que

$$B(0) = \begin{pmatrix} b_1(0) \\ b_2(0) \\ \vdots \\ b_m(0) \end{pmatrix}, \quad (2.101)$$

⁸Para não sobrecarregar a representação matricial a notação será abreviada.

podendo ser reescrita como

$$B(t) = B(0) \left[\exp \int_0^t (D_d(t') + D_{ad}(t') + D_{nad}(t')) dt' \right], \quad (2.102)$$

onde cada termo do integrando da Eq. (2.102) pode ser identificado por

$$D_d(t) = \begin{pmatrix} \frac{-iE_1}{\hbar} & & & \\ & \frac{-iE_2}{\hbar} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{-iE_m}{\hbar} \end{pmatrix}, \quad (2.103)$$

$$D_{ad}(t) = - \begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | \dot{\varphi}_1 \rangle & & & \\ & \langle \varphi_2 | \dot{\varphi}_2 \rangle & & \\ & & \ddots & \\ & & & \langle \varphi_m | \dot{\varphi}_m \rangle \end{pmatrix} \quad (2.104)$$

e

$$D_{nad}(t) = - \begin{pmatrix} 0 & \frac{\langle \varphi_1 | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_2 \rangle}{E_2 - E_1} & \frac{\langle \varphi_1 | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_3 \rangle}{E_3 - E_1} & \cdots & \frac{\langle \varphi_1 | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_m \rangle}{E_m - E_1} \\ \frac{\langle \varphi_2 | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_1 \rangle}{E_1 - E_2} & 0 & \frac{\langle \varphi_2 | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_3 \rangle}{E_3 - E_2} & \cdots & \frac{\langle \varphi_2 | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_m \rangle}{E_m - E_2} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\langle \varphi_m | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_1 \rangle}{E_1 - E_m} & \frac{\langle \varphi_m | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_2 \rangle}{E_2 - E_m} & \cdots & \frac{\langle \varphi_m | \dot{\mathbf{H}} | \varphi_{m-1} \rangle}{E_{m-1} - E_m} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.105)$$

A Eq. (2.102), tal como dito na Ref. [3], pode ser encarada como uma expressão efetiva para a evolução geral de um estado quântico, mesmo este sendo expandido numa base infinita de autoestados ($m \rightarrow \infty$). As matrizes (2.103, 2.104, 2.105), denotadas por $D_d(t)$, $D_{ad}(t)$ e $D_{nad}(t)$ manifestam os efeitos dinâmico, adiabático e não-adiabático, respectivamente. Ambas as matrizes $D_d(t)$ e $D_{ad}(t)$ são diagonais e sem acoplamento entre os diferentes autoestados. Tal como mencionado anteriormente (ver Eq. (2.33)), os elementos de $D_{ad}(t)$ são imaginários puros (em uma base de autoestados normalizada), consistentes com a condição adiabática. Geralmente com elementos complexos, a matriz $D_{nad}(t)$ manifesta os efeitos não-adiabáticos através das transições que ocorrem entre os diferentes autoestados e em certos casos, sua aplicação requer o uso de cálculos numéricos [3].

Sendo :

$$D_{\theta}(t) = -i \int_0^t D_d(t') dt' , \quad (2.106)$$

$$D_{\gamma}(t) = -i \int_0^t D_{ad}(t') dt' , \quad (2.107)$$

$$D_{\gamma_{nad}}(t) = -i \int_0^t D_{nad}(t') dt' , \quad (2.108)$$

e assim, com

$$D_{\theta}(t) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_1(t') dt' & & & \\ & -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_2(t') dt' & & \\ & & \ddots & \\ & & & -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_m(t') dt' \end{pmatrix} , \quad (2.109)$$

uma vez que,

$$\theta_m = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_m(t') dt' , \quad \text{para } m \text{ um inteiro qualquer} , \quad (2.110)$$

então, de forma ainda mais abreviada,

$$D_{\theta}(t) = \begin{pmatrix} \theta_1 & & & \\ & \theta_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \theta_m \end{pmatrix} , \quad (2.111)$$

seguida das matrizes

$$D_{\gamma}(t) = \begin{pmatrix} \gamma_1 & & & \\ & \gamma_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \gamma_m \end{pmatrix} , \quad (2.112)$$

com

$$\gamma_m(t) = i \int_0^t \langle \varphi_m | \dot{\varphi}_m \rangle dt' , \quad \text{para } m \text{ um inteiro qualquer} , \quad (2.113)$$

$$D_{\gamma^{nad}}(t) = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_{1,2}^{nad} & \cdots & \gamma_{1,m}^{nad} \\ \gamma_{2,1}^{nad} & 0 & \cdots & \gamma_{2,m}^{nad} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \gamma_{m,1}^{nad} & \cdots & \gamma_{m,m-1}^{nad} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.114)$$

em que

$$\gamma_{m,n}^{nad}(t) \equiv i \int_0^t \langle \varphi_m | \dot{\varphi}_n \rangle dt', \quad (m \neq n), \quad (2.115)$$

é definida como a fase geométrica não-adiabática, e dessa forma, a Eq. (2.102) pode ser reescrita como,

$$B(t) = B(0) \exp \left[i \left(D_\theta(t) + D_\gamma(t) + D_{\gamma^{nad}}(t) \right) \right]. \quad (2.116)$$

As matrizes $D_\theta(t)$, $D_\gamma(t)$ e $D_{\gamma^{nad}}(t)$ são denominadas por: matriz de fase dinâmica, matriz de fase geométrica adiabática e matriz de fase geométrica não-adiabática, respectivamente.

É possível reconhecer na Eq. (2.102) uma formulação apropriada que represente evoluções adiabáticas e não-adiabáticas, bem como evoluções periódicas e não-periódicas. Se originalmente o sistema encontra-se em um dado autoestado, após evoluir adiabaticamente, os elementos de $D_{nad}(t)$ serão todos nulos (não há transições). Porém, se a evolução não for adiabática, o sistema estará sujeito a transicionar para outro nível de energia.

Podemos também reparametrizar essas matrizes em função dos campos clássicos ($\vec{\mathbf{R}}$),

$$\int_0^t D_\gamma(t') dt' = \int_{\vec{\mathbf{R}}(0)}^{\vec{\mathbf{R}}(t)} \tilde{D}_\gamma(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}}, \quad (2.117)$$

em que

$$\tilde{D}_\gamma(\vec{\mathbf{R}}) = - \begin{pmatrix} \langle \varphi_1 | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_1 \rangle & & & & \\ & \langle \varphi_2 | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_2 \rangle & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \langle \varphi_m | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m \rangle \end{pmatrix}. \quad (2.118)$$

De forma similar, obtém-se

$$\int_0^t D_{nad}(t') dt' = \int_{\vec{\mathbf{R}}(0)}^{\vec{\mathbf{R}}(t)} \tilde{D}_{nad}(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}}, \quad (2.119)$$

onde

$$\tilde{D}_{nad}(\vec{\mathbf{R}}) = - \begin{pmatrix} 0 & \langle \varphi_1 | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_2 \rangle & \langle \varphi_1 | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_3 \rangle & \cdots & \langle \varphi_1 | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m \rangle \\ \langle \varphi_2 | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_1 \rangle & 0 & \langle \varphi_2 | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_3 \rangle & \cdots & \langle \varphi_2 | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m \rangle \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \langle \varphi_m | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_m | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_2 \rangle & \cdots & \langle \varphi_m | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_{m-1} \rangle & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.120)$$

Com isso, a Eq. (2.102) pode também ser reescrita como

$$B(t) = B(0) \left[\exp \left(\int_{\vec{\mathbf{R}}(0)}^{\vec{\mathbf{R}}(t)} \tilde{D}_{nad}(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} + \int_{\vec{\mathbf{R}}(0)}^{\vec{\mathbf{R}}(t)} \tilde{D}_\gamma(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} + \int_0^t D_\theta(t') dt' \right) \right]. \quad (2.121)$$

Para evoluções periódicas, em que $\vec{\mathbf{R}}(0) = \vec{\mathbf{R}}(T)$,

$$B(T) = B(0) \left[\exp \left(\oint_C \tilde{D}_{nad}(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} + \oint_C \tilde{D}_\gamma(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} + \int_0^T D_\theta(t') dt' \right) \right], \quad (2.122)$$

onde C denota um circuito fechado no espaço de parâmetros. Da matriz (2.118), pode-se reescrevê-la como

$$\oint_C \tilde{D}_\gamma(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} = \begin{pmatrix} i\gamma_1 & & & \\ & i\gamma_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & i\gamma_m \end{pmatrix}, \quad (2.123)$$

onde $\gamma_m(C)$ é dada pela Eq. (2.39).

Para uma evolução cíclica no espaço de parâmetros, a fase geométrica não-adiabática parametrizada em função dos campos clássicos fica

$$\begin{aligned} \gamma_{m,n}^{nad} &= i \oint_C \langle \varphi_m | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_n \rangle \cdot d\vec{\mathbf{R}} \\ &= \iint_S \vec{\mathbf{V}}_{m,n}^{nad}(\vec{\mathbf{R}}) \cdot \hat{\mathbf{e}}_n(\vec{\mathbf{R}}) ds, \end{aligned} \quad (2.124)$$

em que, é definida a grandeza análoga a curvatura de Berry, aqui designada por curvatura não-adiabática, dada por

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{V}}_{m,n}^{nad}(\vec{\mathbf{R}}) &\equiv \left(\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} \times \left(i \langle \varphi_m | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_n \rangle \right) \right) \\ &= i \left((\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \langle \varphi_m |) \times (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m \rangle) \right). \end{aligned} \quad (2.125)$$

Introduzindo um conjunto completo de estados $\{|\varphi_l\rangle\}$ na Eq. (2.125), encontramos a expressão

$$\vec{\mathbf{V}}_{m,n}^{nad}(\vec{\mathbf{R}}) = i \sum_l \left((\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \langle \varphi_m |) | \varphi_l \rangle \times \langle \varphi_l | (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_n \rangle) \right), \quad (2.126)$$

para que em seguida, com algumas manipulações, possamos determinar a equação

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{V}}_{m,n}^{nad}(\vec{\mathbf{R}}) = & i \left(\frac{\langle \varphi_m | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \mathbf{H} | \varphi_n \rangle \times \left((\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \langle \varphi_m |) | \varphi_m \rangle + \langle \varphi_n | (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_n \rangle) \right)}{(E_m - E_n)} \right) + \\ & + i \left(\sum_{\substack{l \\ l \neq m,n}} \frac{\langle \varphi_m | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \mathbf{H} | \varphi_l \rangle \times \langle \varphi_l | \nabla_{\vec{\mathbf{R}}} \mathbf{H} | \varphi_n \rangle}{(E_m - E_l)(E_n - E_l)} \right), \end{aligned} \quad (2.127)$$

análoga a segunda forma da curvatura de Berry (ver Eq. (2.51)).

Capítulo 3

TEOREMA ADIABÁTICO

A hipótese adiabática foi formulada em 1916 por Ehrenfest [61], a qual afirma que "*qualquer estado que se transforma adiabaticamente nos parâmetros do sistema, retorna novamente a um estado definido com os mesmos números quânticos*". Em 1928, Born e Fock [59] demonstraram a hipótese adiabática de Ehrenfest por meio do teorema adiabático, para estados de sistemas quânticos não-degenerados. Porém, efeitos de fases geométricas não foram incluídos na abordagem original de Born e Fock, sendo mencionada apenas anos mais tarde por Pancharatnam [13], Herzberg e Longuet-Higgins [62,63], Stone [64] e Mead e Trulhar [65] e tratada formalmente por Michel V. Berry [2].

Em 1950, um tratamento matemático mais rigoroso da aproximação adiabática foi dado por Tosio Kato [66], e seus resultados foram empregados em diversos trabalhos [67–71], tornando a teoria mais sofisticada. Na Ref [72], onde os autores discutem os chamados estados topológicos da matéria, é feita uma revisão da demonstração do teorema adiabático dada nas abordagens de Born e Fock como também no formalismo de T. Kato. Fases geométricas e o transporte paralelo na condição de uma evolução temporal adiabática também são explorados nessa referência.

Na Ref. [73], A.C. Aguiar *et al* faz uma aplicação da aproximação adiabática ao tratar o sistema de dois níveis, consistindo numa partícula de spin 1/2 acoplada a um campo magnético externo dependente do tempo. É feita então, uma análise detalhada das equações diferenciais acopladas demonstrando claramente o motivo de se negligenciar os termos não-diagonais (acoplados). Isto é, os autores analisam o chamada frequência de Rabi na condição de que a frequência das transições eletrônicas entre os estados *up* e *down* ser muito maior que a frequência de precessão de Larmor. Na Ref. [32], M.T. Thomaz *et al* retomam o sistema abordado na Ref. [73] e encontraram as fases geométricas associadas a dinâmica desse modelo.

Na Ref. [74], o autor A.C. Aguiar Pinto *et al* emprega a aproximação adiabática ao tratar sistemas quânticos não degenerados via matriz densidade. É possível encontrar uma vasta discussão teórica nas Refs. [75–81] e experimental na Ref. [82] sobre a validade e aplicabilidade do Teorema Adiabático. Porém, não vamos nos deter as nuances matemáticas

tratadas nessas referências, pois elas estão aquém do escopo teórico deste trabalho.

Neste capítulo, tomadas as considerações anteriores, a demonstração do teorema adiabático será feita na representação de Schrödinger tal como foi originalmente abordada na Ref. [4].

3.1 Demonstração do teorema adiabático para sistemas de espectro degenerado

A descrição da evolução de sistemas quânticos que interagem entre si ou com o ambiente com escalas de tempo muito diferentes [83], é feita por operadores Hamiltonianos dependentes de certos parâmetros que variam adiabaticamente no tempo. A demonstração do Teorema adiabático, originalmente feita por Born e Fock [59], também pode ser encontrado em vários livros-texto [84, 85]. Sendo T o período associado a interação (via campos clássicos $\vec{R}(T)$) do Hamiltoniano $\mathbf{H}(T)$ ¹ com o ambiente e τ o período associado aos fenômenos quânticos de transições eletrônicas a condição de evolução adiabática é atingida quando $T \gg \tau$.

Dado um sistema quântico governado por um Hamiltoniano $\mathbf{H}(t)$ cuja variação é adiabática no tempo com período característico T , seu espectro de energia pode ser degenerado, porém, a degenerescência de cada nível de energia não muda com o tempo. De sua condição inicial, $|\psi(0)\rangle$, o sistema poderá ser encontrado num instante qualquer no estado $|\psi(t)\rangle$ por meio da Eq. de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \mathbf{H}(t) |\psi(t)\rangle . \quad (3.1)$$

Para que o vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ possa ser escrito como uma superposição de autoestados de $\mathbf{H}(t)$ e dessa forma, satisfazer a equação anterior é necessário que em cada instante t , o Hamiltoniano tenha um conjunto completo de autoestados $\{|\varphi_n^{(\lambda_n)}; t\rangle\}$. Aqui, são válidas as relações de, completeza

$$\sum_n \sum_{\lambda_n=1}^{D_n} |\varphi_n^{(\lambda_n)}; t\rangle \langle \varphi_n^{(\lambda_n)}; t| = \mathbf{1}, \quad (\lambda_n = 1, 2, \dots, D_n), \quad (3.2)$$

em que $\mathbf{1}$ é o operador identidade, e D_n é o grau de degenerescência associado ao autovalor $E_n(t)$, com $E_n(t) \neq E_m(t)$ para $n \neq m$, e a relação de ortonormalidade

$$\langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; t | \varphi_n^{(\lambda_n)}; t \rangle = \delta_{m,n} \delta_{\lambda_m, \lambda_n}. \quad (3.3)$$

Com equação de autovalor instantânea,

$$\mathbf{H}(t) |\varphi_n^{(\lambda_n)}; t\rangle = E_n(t) |\varphi_n^{(\lambda_n)}; t\rangle . \quad (3.4)$$

¹Por conveniência, para simplificar a notação adota-se $\mathbf{H}(\vec{R}(t)) = \mathbf{H}(t)$.

Definindo uma nova variável adimensional s tal como em [59],

$$s \equiv \frac{t}{T}, \quad (3.5)$$

o vetor de estado que representa o sistema em cada "instante" s escrito na base de $\mathbf{H}(s)$ é:

$$|\psi(s)\rangle = \sum_n \sum_{\lambda_n=1}^{D_n} c_n^{(\lambda_n)}(s) \exp\left[-\frac{iT}{\hbar} \int_0^s E_n(s') ds'\right] |\varphi_n^{(\lambda_n)}; s\rangle. \quad (3.6)$$

Para que o vetor de estado $|\psi(s)\rangle$ possa representar o sistema sob evolução adiabática é necessário que se tome algumas correções nos coeficientes $c_n^{(\lambda_n)}(s)$ no limite de $T \rightarrow \infty$. Dessa forma, substituindo a Eq. (3.6) na Eq. de Schrödinger (3.1), encontram-se um conjunto de equações diferenciais,

$$\frac{dc_m^{(\lambda_m)}(s)}{ds} = - \sum_n \sum_{\lambda_n=1}^{D_n} \exp\left(\frac{iT}{\hbar} \int_0^s [E_m(s') - E_n(s')] ds'\right) \langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s | \left(\frac{d}{ds} |\varphi_n^{(\lambda_n)}; s\rangle\right) c_n^{(\lambda_n)}(s), \quad (3.7)$$

em que, $\lambda_m = 1, 2, \dots, D_m$.

Analogamente ao que foi feito anteriormente (ver capítulo (2), subseção (2.1.1)), o termo $\langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s | \left(\frac{d}{ds} |\varphi_n^{(\lambda_n)}; s\rangle\right)$ é dado por:

$$\langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s | \left(\frac{d}{ds} |\varphi_n^{(\lambda_n)}; s\rangle\right) = \frac{\langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s | \frac{d\mathbf{H}(s)}{ds} |\varphi_n^{(\lambda_n)}; s\rangle}{[E_n(s) - E_m(s)]}, \quad \text{para } m \neq n. \quad (3.8)$$

Considerando a igualdade (3.8) na Eq. (3.7) e separando convenientemente os termos em que $m = n$ e $m \neq n$, encontra-se

$$\begin{aligned} \frac{dc_m^{(\lambda_m)}(s)}{ds} = & - \sum_{\lambda'_m=1}^{D_m} \langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s | \left(\frac{d}{ds} |\varphi_m^{(\lambda'_m)}; s\rangle\right) c_m^{(\lambda'_m)}(s) - \\ & \sum_{\substack{n, \\ n \neq m}} \sum_{\lambda_n=1}^{D_n} \exp\left(\frac{iT}{\hbar} \int_0^s [E_m(s') - E_n(s')] ds'\right) \frac{\langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s | \frac{d\mathbf{H}(s)}{ds} |\varphi_n^{(\lambda_n)}; s\rangle}{[E_n(s) - E_m(s)]} c_n^{(\lambda_n)}(s). \end{aligned} \quad (3.9)$$

A integral da equação (3.9), sobre a variável s , com $s > 0$, é

$$\begin{aligned} c_m^{(\lambda_m)}(s) = & c_m^{(\lambda_m)}(0) - \sum_{\lambda'_m=1}^{D_m} \int_0^s \left(\langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s_1 | \left(\frac{d}{ds_1} |\varphi_m^{(\lambda'_m)}; s_1\rangle\right) c_m^{(\lambda'_m)}(s_1) ds_1 \right) - \\ & \sum_{\substack{n, \\ n \neq m}} \sum_{\lambda_n=1}^{D_n} \int_0^s \left(\exp\left(\frac{iT}{\hbar} \int_0^{s_1} [E_m(s') - E_n(s')] ds'\right) \frac{\langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s_1 | \frac{d\mathbf{H}(s_1)}{ds_1} |\varphi_n^{(\lambda_n)}; s_1\rangle}{[E_n(s_1) - E_m(s_1)]} c_n^{(\lambda_n)}(s_1) \right) ds_1. \end{aligned} \quad (3.10)$$

O Teorema de Riemann-Lebesgue [86,87], diz que para qualquer função $F(x)$, contínua no intervalo $x \in [a, b]$, tem-se que:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow \infty} \int_a^b F(x) e^{i\epsilon x} dx = 0. \quad (3.11)$$

Com o propósito de reescrever a expressão contida na somatória da terceira parcela do lado direito da igualdade da Eq. (3.10) na forma da identidade (3.11), a seguinte definição é feita,

$$I_{n,m}^{(\lambda_n, \lambda_m)}(s) \equiv \int_0^s \left(\exp \left(\frac{iT}{\hbar} \int_0^{s_1} [E_m(s') - E_n(s')] ds' \right) \frac{\langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s_1 | \frac{d\mathbf{H}(s_1)}{ds_1} | \varphi_n^{(\lambda_n)}; s_1 \rangle}{[E_n(s_1) - E_m(s_1)]} c_n^{(\lambda_n)}(s_1) \right) ds_1. \quad (3.12)$$

Para legitimar a aplicação da identidade do Teorema de Riemann-Lebesgue na Eq. (3.12) é preciso considerar também a seguinte definição,

$$g(s) \equiv \frac{1}{\hbar} \int_0^s [E_m(s_1) - E_n(s_1)] ds_1. \quad (3.13)$$

Em função da definição (3.13), $I_{n,m}^{(\lambda_n, \lambda_m)}(s)$ ficará,

$$I_{n,m}^{(\lambda_n, \lambda_m)}(s) = - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{\hbar} \int_{g(0)}^{g(s)} e^{iTg} \langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; g | \frac{d\mathbf{H}(g)}{dg} | \varphi_n^{(\lambda_n)}; g \rangle c_n^{(\lambda_n)}(g) \frac{dg}{\dot{g}} = 0, \quad (3.14)$$

sendo $\dot{g} = dg(s)/ds$. Fazendo uso do resultado obtido em (3.14) aplicado à Eq. (3.10), para $n \neq m$, no limite adiabático ($T \rightarrow \infty$), encontra-se

$$c_m^{(\lambda_m)}(s) = c_m^{(\lambda_m)}(0) - \sum_{\lambda'_m=1}^{D_m} \int_0^s \langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s | \left(\frac{d}{ds} | \varphi_m^{(\lambda'_m)}; s \rangle \right) c_m^{(\lambda'_m)}(s_1) ds_1, \quad (3.15)$$

ou alternativamente na forma diferencial,

$$\frac{dc_m^{(\lambda_m)}(s)}{ds} = - \sum_{\lambda'_m=1}^{D_m} \langle \varphi_m^{(\lambda_m)}; s | \left(\frac{d}{ds} | \varphi_m^{(\lambda'_m)}; s \rangle \right) c_m^{(\lambda'_m)}(s). \quad (3.16)$$

Esse resultado é conhecido pelo teorema adiabático [59]. Para um autovalor $E_m(t)$ não degenerado, tem-se $D_m = 1$. As equações (3.15) e (3.16) mostram que se originalmente o sistema foi preparado no estado $|\psi(0)\rangle$ associado ao autovalor degenerado de energia $E_m(0)$, as transições quânticas (eletrônicas) ocorreram apenas entre os estados pertencentes ao m -ésimo autosubespaço.

Na na Ref. [88], os autores Gustavo Rigolin e Gerardo Ortiz introduziram uma teoria de perturbação adiabática para sistemas quânticos com espectro de energia degenerado. A série perturbativa encontrada por eles, permite que se estabeleça com rigor as condições para a validade do teorema adiabático da mecânica quântica para estes sistemas degenerados.

Segundo eles, o mesmo formalismo pode ser usado para encontrar correções não adiabáticas para a fase geométrica não Abelianas discutida por Wilczek-Zee [9]. Esses mesmos autores, na Ref. [89], ao se utilizarem da teoria discutida na Ref. [88], propõem um tratamento matemático rigoroso do Teorema adiabático para o caso de sistemas de espectro degenerado, estabelecendo uma condição necessária e outra suficiente para sua validade. Eles ilustraram a aplicabilidade dessas condições a um problema degenerado dependente do tempo com solução exata.

Capítulo 4

FASE GEOMÉTRICA EM REPRESENTAÇÕES ALTERNATIVAS

4.1 Fase geométrica de Berry via representação das integrais de trajetória

A formulação local da mecânica quântica é feita via Equação de Schrödinger, e sua correspondente descrição global é dada pela formulação das Integrais de Trajetória, a qual permite conhecer a função de onda num instante posterior dado o conhecimento de sua forma num instante inicial [4]. A proposta original de M.V. Berry [2] foi mostrar a fase geométrica, por meio da Eq. de Schrödinger, de um sistema quântico que evoluía adiabaticamente e cujo Hamiltoniano (com espectro de energia não-degenerado) apresentava uma dependência temporal que manifestava a interação do sistema com suas vizinhanças.

Em seu trabalho, "*Quantum adiabatic anholonomy*" [5], Berry mostrou como obter a fase geométrica na representação das Integrais de Trajetória através de estados com evolução adiabática cíclica guiados também por um Hamiltoniano de espectro de energia não-degenerado. A particularidade da representação das Integrais de Trajetória está em adotar amplitudes de probabilidades, isto é, funções em detrimento dos operadores, normalmente empregados em outras representações na mecânica quântica (Schrödinger e Heisenberg).

Em mecânica clássica, para certas condições iniciais e de contorno, a equação que caracteriza o movimento de uma partícula possui solução única, isto é, existirá uma única trajetória, que conecta dois pontos terminais capaz de representar a dinâmica da partícula. Porém, as Integrais de Trajetória, escritas no espaço das coordenadas de posição e de momento, consideram a amplitude de transição sobre os estados representados por esses pontos terminais como a soma das contribuições elementares de todas as possíveis trajetórias que conectem esses pontos [90].

Kuratsuji e Ida [83] expressaram a Integral de Trajetória de dois sistemas quânticos com escalas de tempo de evolução muito diferentes. Eles mostraram como o Hamiltoniano

efetivo do sistema lento é modificado pela presença da fase geométrica adquirida pelo sistema (de evolução) mais veloz. Kuratsuji [91] também obteve uma fase geométrica associada a uma evolução cíclica geral ao usar as integrais de trajetória na abordagem de estados-coerentes. Zheng-chuan e Bo-zang [92] obtiveram uma correção na regra de quantização Bohr-Sommerfeld partindo diretamente da definição de Integrais de Trajetória e assim considerando a influência da fase geométrica.

Esta seção mostrará como um sistema quântico (degenerado e não-degenerado) sob evolução adiabática irá adquirir uma fase geométrica, precisamente a fase de Berry. Isto advém da aplicação direta do Teorema Adiabático à evolução dos autoestados de energia. Tomamos a expansão do operador de evolução temporal numa sucessão de evoluções temporais de duração infinitesimal, e assim por meio da chamada abordagem por Integrais de Trajetória (caminho), exploradas nas Refs. [4, 5], demonstra-se o surgimento da fase de Berry.

4.1.1 Fase geométrica de Berry de sistemas quânticos não-degenerados

Dado um sistema quântico, governado por um operador Hamiltoniano $\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t))$ de espectro de energia não-degenerado cuja interação com o meio externo se faz através dos campos clássicos $\vec{\mathbf{R}}(t)$. As modificações que se manifestam no Hamiltoniano ocorrem num período T , muito maior que a escala de tempo associado ao período τ das transições eletrônicas. Dessa forma, para cada instante t existirá um conjunto completo de autoestados de $\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t))$ que formam base $\{|\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle\}$ e portanto, sendo válidas as relações de completudeza

$$\sum_n |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)| = \mathbf{1}, \quad (4.1)$$

onde $\mathbf{1}$ é o operador identidade, e ortonormalidade

$$\langle \varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t) | \varphi_m; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle = \delta_{n,m}, \quad (4.2)$$

e Eq. de autovalor para cada instante,

$$\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle = E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_n; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle. \quad (4.3)$$

A fim de simplificar a notação empregada, a dependência paramétrica dos campos clássicos $\vec{\mathbf{R}}(t)$ será omitida e dessa forma, tanto os operadores quanto autovalores e vetores de estado serão escritos explicitamente em função do tempo.

No instante inicial ($t = 0$), o sistema é descrito por uma combinação de autoestados de $\mathbf{H}(0)$,

$$|\psi(0)\rangle = \sum_m c_m(0) |\varphi_m; 0\rangle. \quad (4.4)$$

Para encontrar $|\psi(t)\rangle$, onde t é um instante qualquer, será necessário tomar a evolução temporal de $|\psi(0)\rangle$ respeitando a condição adiabática ($T \gg \tau$). Fazendo então uma subdivisão do intervalo finito de evolução, tal que $t = N\Delta t$, e no limite em que $N \rightarrow \infty$ tem-se $\Delta t \rightarrow 0$. Em cada subintervalo existirá um conjunto completo de autoestados de $\mathbf{H}(t)$, porém, em geral $[\mathbf{H}(t_i), \mathbf{H}(t_j)] \neq 0$, para $t_i \neq t_j$. Para um infinitésimo de tempo Δt , a evolução do sistema será dada através do operador linear de evolução temporal $\mathbf{U}(t + \Delta t)$ [93],

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = \mathbf{U}(t + \Delta t) |\psi(t)\rangle . \quad (4.5)$$

o operador $\mathbf{U}(t + \Delta t)$ obedece a chamada lei da composição, isto é, uma vez considerado o intervalo de evolução $t \in [0, t + \Delta t]$ tem-se,

$$\mathbf{U}(t + \Delta t, 0) \equiv \mathbf{U}(t + \Delta t, t)\mathbf{U}(t, 0) . \quad (4.6)$$

Sendo $\mathbf{U}(t + \Delta t)$ dado por:

$$\mathbf{U}(t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}(t)\Delta t} , \quad (4.7)$$

então, a Eq. (4.5) torna-se

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}(t)\Delta t} |\psi(t)\rangle . \quad (4.8)$$

No limite de $\Delta t \rightarrow 0$ o operador $\mathbf{U}(t + \Delta t)$ pode ser expandido até primeira ordem em Δt ,

$$\mathbf{U}(t + \Delta t) \approx \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}\mathbf{H}(t)\Delta t + \mathcal{O}((\Delta t)^2) , \quad (4.9)$$

e da definição de derivada temporal do vetor de estado $|\psi(t)\rangle$,

$$\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{|\psi(t + \Delta t)\rangle - |\psi(t)\rangle}{\Delta t} \right) , \quad (4.10)$$

a dinâmica dos sistema fica perfeitamente determinada com,

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{\mathbf{1} - \frac{i}{\hbar}\mathbf{H}(t)\Delta t - \mathbf{1}}{\Delta t} \right) |\psi(t)\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}(t) |\psi(t)\rangle . \end{aligned} \quad (4.11)$$

Dessa forma, estando o sistema inicialmente dado pela Eq. (4.4), sujeitá-lo a uma evolução temporal consiste em fazer

$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t, 0) |\psi(0)\rangle . \quad (4.12)$$

Da definição dada na Eq. (4.6), o operador $\mathbf{U}(t, 0)$ pode ainda ser tomado como

$$\mathbf{U}(t_N, 0) = \mathbf{U}(t_N, t_{N-1})\mathbf{U}(t_{N-1}, t_{N-2}) \dots \mathbf{U}(t_2, t_1)\mathbf{U}(t_1, 0) , \quad (4.13)$$

com a particularidade de ser um operador unitário, uma vez que,

$$\mathbf{U}^\dagger(t_N, 0) = \mathbf{U}^\dagger(t_1, 0)\mathbf{U}(t_2, t_1) \dots \mathbf{U}^\dagger(t_{N-1}, t_{N-2})\mathbf{U}^\dagger(t_N, t_{N-1}), \quad (4.14)$$

e conseqüentemente,

$$\mathbf{U}(t_N, 0)\mathbf{U}^\dagger(t_N, 0) = \mathbf{1}. \quad (4.15)$$

Portanto, a Eq. (4.12) fica,

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \mathbf{U}(t_N, t_{N-1})\mathbf{U}(t_{N-1}, t_{N-2}) \dots \mathbf{U}(t_2, t_1)\mathbf{U}(t_1, 0) |\psi(0)\rangle \\ &= \sum_m c_m(0) \mathbf{U}(t_N, t_{N-1})\mathbf{U}(t_{N-1}, t_{N-2}) \dots \mathbf{U}(t_2, t_1)\mathbf{U}(t_1, 0) |\varphi_m; 0\rangle. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Projetando o vetor $|\vec{x}\rangle$, da base do espaço das coordenadas de posição, sobre a Eq. (4.16), encontra-se a função de onda $\psi(\vec{x}, t)$

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle &= \psi(\vec{x}, t) \\ &= \sum_m c_m(0) \left(\langle \vec{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}((N-1)\Delta t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}((N-2)\Delta t)} \dots e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}(\Delta t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}(0)} | \varphi_m; 0 \rangle \right). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Para reescrever a Eq.(4.17) na representação das Integrais de Trajetória [4, 5] é necessário introduzir o operador identidade, como na Eq.(4.1), entre cada subintervalo temporal, $t_j = j\Delta t$, com $j = 0, 1, 2, \dots, (N-1)$ quando $\Delta t \rightarrow 0$. Dessa forma, os operadores serão substituídos por funções, favorecendo a representação,

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= \sum_m c_m(0) \left(\sum_{n_0, n_1, \dots, n_{N-1}} \langle \vec{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}((N-1)\Delta t)} | \varphi_{n_{N-1}}; (N-1)\Delta t \rangle \langle \varphi_{n_{N-1}}; (N-1)\Delta t | \times \right. \\ &\quad \times | \varphi_{n_{N-2}}; (N-2)\Delta t \rangle \langle \varphi_{n_{N-2}}; (N-2)\Delta t | \times \dots \times \langle \varphi_{n_1}; \Delta t | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}(0)} | \varphi_{n_0}; 0 \rangle \langle \varphi_{n_0}; 0 | \varphi_m; 0 \rangle \left. \right). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Da Eq.(4.8), tem-se que $e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}(t_i)} | \varphi_{n_i}; t_i \rangle$ é a evolução do vetor de estado $|\varphi_{n_i}; t_i\rangle$ durante o intervalo de tempo Δt . Do Teorema Adiabático (ver capítulo (3), seção (3.1), para o caso não-degenerado com $D_m = 1$), obtém-se

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}(t_i)} | \varphi_{n_i}; t_i \rangle \propto | \varphi_{n_i}; t_i + \Delta t \rangle. \quad (4.19)$$

Conseqüentemente, fazendo uso da relação de ortonormalidade (4.2), ao projetar a Eq. (4.19) sobre o vetor $\langle \varphi_{n_{i+1}}; t_i + \Delta t |$, encontra-se

$$\langle \varphi_{n_{i+1}}; t_i + \Delta t | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}(t_i)} | \varphi_{n_i}; t_i \rangle \propto \delta_{n_{i+1}, n_i}. \quad (4.20)$$

A Eq.(4.19) mostra que apenas um autoestado (ou autofunção no espaço de Hilbert) é contemplado em cada instante t , durante evolução adiabática. Esse único estado é o autoestado de energia multiplicado por uma função complexa com dependência temporal através do

parametro $\vec{R}(t)$ (ver Eq. (3.16)). Substituindo a Eq. (4.20) na Eq. (4.18), e tomando o limite $\Delta t \rightarrow 0$, encontramos

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_m c_m(0) \varphi_m(\vec{x}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^{t_i=N-1} E_m(t_i) \Delta t} \langle \varphi_m; (N-1)\Delta t | \varphi_m; (N-2)\Delta t \rangle \times \dots \times \langle \varphi_m; \Delta t | \varphi_m; 0 \rangle, \quad (4.21)$$

com $\varphi_m(\vec{x}, t) \equiv \langle \vec{x} | \varphi_m; (N-1)\Delta t \rangle$. Da definição da derivada temporal de um vetor de estado,

$$\frac{d|\varphi_m; t\rangle}{dt} \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{|\varphi_m; t + \Delta t\rangle - |\varphi_m; t\rangle}{\Delta t} \right), \quad (4.22)$$

tem-se então que,

$$\begin{aligned} \langle \varphi_m; (l+1)\Delta t | \varphi_m; l\Delta t \rangle &= 1 + \Delta t \left(\frac{d}{dt} \langle \varphi_m; l\Delta t | \varphi_m; l\Delta t \rangle \right) \\ &= e^{\Delta t \left(\frac{d}{dt} \langle \varphi_m; l\Delta t | \varphi_m; l\Delta t \rangle \right)} + \mathcal{O}((\Delta t)^2), \end{aligned} \quad (4.23)$$

com $l = 0, 1, 2, \dots, (N-2)$.

O resultado anterior será tomado em cada subintervalo Δt na Eq. (4.21),

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= \sum_m c_m(0) \varphi_m(\vec{x}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^{t_i=N-1} E_m(t_i) \Delta t} e^{-\langle \varphi_m; \Delta t_{N-1} | \left(\frac{d}{dt} |\varphi_m; \Delta t_{N-2} \rangle \right) \cdot \Delta t} \times \\ &\times e^{-\langle \varphi_m; \Delta t_{N-2} | \left(\frac{d}{dt} |\varphi_m; \Delta t_{N-3} \rangle \right) \cdot \Delta t} \dots e^{-\langle \varphi_m; \Delta t_1 | \left(\frac{d}{dt} |\varphi_m; \Delta t_0 \rangle \right) \cdot \Delta t}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

A soma feita sobre todos os intervalos de tempo quando tomado o limite $\Delta t \rightarrow 0$, transforma-se numa integral e assim a função de onda $\psi(\vec{x}, t)$ assume a forma,

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_m c_m(0) \varphi_m(\vec{x}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_m(t') dt'} e^{-\int_0^t \langle \varphi_m; t' | \left(\frac{d}{dt'} |\varphi_m; t' \rangle \right) dt'}, \quad (4.25)$$

uma vez tomadas as definições (2.8) e (2.22) (ver Cap. (2)), a função de onda pode agora ser escrita de forma familiar,

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_m c_m(0) e^{i\theta_m(t)} e^{i\gamma_m(t)} \varphi_m(\vec{x}, t). \quad (4.26)$$

De acordo com os autores da Ref. [4], se originalmente o estado inicial que representa o sistema for um autoestado do operador Hamiltoniano, apenas uma única "trajetória" no espaço de Hilbert fornece contribuições a função de onda $\psi(\vec{x}, t)$. Essa "trajetória" é por sua vez, a evolução do respectivo autoestado de energia [4].

No caso particular em que a evolução é cíclica ($t = T$), ao fazer $c_m(0) = \delta_{n,m}$, a função de onda $\psi(\vec{x}, t)$ será,

$$\psi(\vec{x}, T) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^T E_n(t') dt'} e^{i\gamma_n(C)} \varphi_n(\vec{x}, 0). \quad (4.27)$$

Essa expressão, corresponde basicamente ao resultado discutido por Berry na Ref. [5] e na Ref. [2], quando projetada sobre o vetor $\langle \vec{x} |$ do espaço das coordenadas de posição.

4.1.2 Fase Geométrica de Berry de sistemas quânticos com espectro de energia degenerado

Nesta seção, o caso em que o operador Hamiltoniano $\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t))$ possui espectro de energia degenerado será analisado. Em cada instante deverá existir um conjunto completo de autoestados de $\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t))$ que formam base $\{|\varphi_n^{(\lambda_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle\}$, e dessa forma sendo válidas as relações de completaza

$$\sum_n \sum_{\lambda_n=1}^{D_n} |\varphi_n^{(\lambda_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \langle \varphi_n^{(\lambda_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)| = \mathbf{1}, \quad (4.28)$$

onde $\mathbf{1}$ é o operador identidade, e ortonormalidade

$$\langle \varphi_n^{(\lambda_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t) | \varphi_m^{(\lambda_m)}; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle = \delta_{n,m} \delta_{\lambda_n, \lambda_m}, \quad (4.29)$$

e Eq. de autovalor para cada instante t ,

$$\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_n^{(\lambda_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle = E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_n^{(\lambda_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle, \quad (4.30)$$

com $\lambda_n = 1, 2, \dots, D_n$, onde D_n é o grau da degenerescência, invariante no tempo, associado ao autovalor $E_n(\vec{\mathbf{R}}(t))$. Para $n \neq m$, tem-se que $E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) \neq E_m(\vec{\mathbf{R}}(t))$.

Como feito na seção anterior, a notação empregada será abreviada usando a dependência temporal explicitamente na representação dos operadores, autovalores e vetores de estado. No instante inicial, o sistema é representado pelo vetor de estado $|\psi(0)\rangle$, escrito como

$$|\psi(0)\rangle = \sum_m \sum_{\lambda_m=1}^{D_m} c_m^{(\lambda_m)}(0) |\varphi_m^{(\lambda_m)}; 0\rangle. \quad (4.31)$$

Assim como foi feito na seção anterior, o estado (4.31) num instante posterior qualquer fica

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m \sum_{\lambda_m=1}^{D_m} c_m^{(\lambda_m)}(0) \mathbf{U}(t_N, t_{N-1}) \mathbf{U}(t_{N-1}, t_{N-2}) \dots \mathbf{U}(t_2, t_1) \mathbf{U}(t_1, 0) |\varphi_m^{(\lambda_m)}; 0\rangle. \quad (4.32)$$

Tomando a projeção da Eq. (4.32) sobre o vetor $\langle \vec{\mathbf{x}} |$ e inserindo o operador identidade (4.28) em cada subintervalo de tempo $t_j = j\Delta t$, com $j = 0, 1, \dots, N-1$, onde $t = N\Delta t$ e $\Delta t \rightarrow 0$, a função de onda $\psi(\vec{\mathbf{x}}, t)$ se apresentará como

$$\begin{aligned} \psi(\vec{\mathbf{x}}, t) = & \sum_m \sum_{\lambda_m=1}^{D_m} \left(\sum_{n_0, n_1, \dots, n_{N-1}} \sum_{\lambda'_{n_0}=1}^{D_{n_0}} \dots \sum_{\lambda'_{n_{N-1}}=1}^{D_{n_{N-1}}} c_m^{(\lambda_m)}(0) \langle \vec{\mathbf{x}} | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}((N-1)\Delta t)} |\varphi_{n_{N-1}}^{(\lambda'_{n_{N-1}})}; (N-1)\Delta t\rangle \times \right. \\ & \left. \times \dots \times \langle \varphi_{n_1}^{(\lambda'_{n_1})}; \Delta t | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}(0)} |\varphi_{n_0}^{(\lambda'_{n_0})}; 0\rangle \langle \varphi_{n_0}^{(\lambda'_{n_0})}; 0 | \varphi_m^{(\lambda_m)}; 0\rangle \right). \end{aligned} \quad (4.33)$$

Em cada instante, o teorema adiabático é aplicado a cada elemento de matriz $\langle \varphi_{n_{k+1}}^{(\lambda_{n_{k+1}})}; t_k + \Delta t | e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}(t_k)} | \varphi_{n_k}^{(\lambda_{n_k})}; t_k \rangle$, de tal modo que o estado $e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}(k\Delta t)} |\varphi_{n_k}^{(\lambda_{n_k})}; k\Delta t\rangle$ é resultante da superposição dos estados degenerados λ_{n_k} com número quântico n_k e autovalor $E_{n_k}((k +$

$1)\Delta t$) (ver Eq.(3.16)). Do ponto de vista das integrais de trajetória, os autores da Ref. [4] argumentam que o Teorema Adiabático funciona como um seletor de estados, isto é, dada a condição de evolução adiabática, as únicas "trajetórias" no espaço de Hilbert que geram contribuições a chamada amplitude de probabilidade e consequentemente a função de onda, $\psi(\vec{x}, t)$, quando inicialmente associada ao autovalor de energia E_{n_k} , serão aqueles pertencentes ao autosubespaço deste mesmo autovalor. Da relação de ortonormalidade (4.29), a função de onda (4.33) torna-se

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) = & \sum_m \sum_{\lambda_m=1}^{D_m} c_m^{(\lambda_m)}(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{t_i=1}^{t_i=N-1} E_m(\Delta t_i) \Delta t} \sum_{\lambda_m^{(1)}, \dots, \lambda_m^{(N-1)}=1}^{D_m} \varphi_m^{(\lambda_m^{(N-1)})}(\vec{x}, t) \times \\ & \times \langle \varphi_m^{(\lambda_m^{(N-1)})}; (N-1)\Delta t | \varphi_m^{(\lambda_m^{(N-2)})}; (N-2)\Delta t \rangle \times \dots \times \langle \varphi_m^{(\lambda_m^{(1)})}; \Delta t | \varphi_m^{(\lambda_m)}; 0 \rangle, \end{aligned} \quad (4.34)$$

sendo $\varphi_m^{(\lambda_m^{(N-1)})}(\vec{x}, t) \equiv \langle \vec{x} | \varphi_m^{(\lambda_m^{(N-1)})}; (N-1)\Delta t \rangle$.

De acordo com a Ref. [4], no limite de $\Delta t \rightarrow 0$,

$$\langle \varphi_m^{(\lambda_m^{(k+1)})}; (k+1)\Delta t | \varphi_m^{(\lambda_m^{(k)})}; k\Delta t \rangle = [\exp(-\Delta t A_m(k\Delta t))]_{\lambda_m^{(k+1)}, \lambda_m^{(k)}} + \mathcal{O}((\Delta t)^2), \quad (4.35)$$

com $\lambda_m^{(k+1)}, \lambda_m^{(k)} = 1, 2, \dots, D_m$. $A_m(t)$ é uma matriz de dimensão $D_m \times D_m$ cujo os elementos são dados por

$$A_{ij}^{(m)}(t) \equiv \langle \varphi_m^{(i)}; t | \left(\frac{d}{dt} | \varphi_m^{(j)}; t \right) \rangle. \quad (4.36)$$

No limite de $\Delta t \rightarrow 0$ e com o auxílio da Eq. (4.35), o lado direito da igualdade da Eq. (4.34) é reescrita como

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_m \sum_{\lambda_m=1}^{D_m} c_m^{(\lambda_m)}(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_m(t') dt'} \sum_{\lambda'_m=1}^{D_m} \varphi_m^{(\lambda'_m)}(\vec{x}, t) U_{\lambda'_m, \lambda_m}^{(m)}(t), \quad (4.37)$$

sendo $U_m(t)$ uma matriz de dimensão $D_m \times D_m$ cujo os elementos são

$$U_{\lambda'_m, \lambda_m}^{(m)}(t) \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[e^{-\Delta t A_m((N-1)\Delta t)} \dots e^{-\Delta t A_m(\Delta t)} e^{-\Delta t A_m(0)} \right]_{\lambda'_m, \lambda_m} \quad (4.38)$$

$$= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[e^{-\sum_{i=0}^{N-1} \Delta t A_m(i\Delta t)} \right]_{\lambda'_m, \lambda_m} \quad (4.39)$$

$$= \mathcal{T} \left[\exp \left(- \int_0^t A_m(t') dt' \right) \right]_{\lambda'_m, \lambda_m} \quad (4.40)$$

com $\lambda'_m, \lambda_m = 1, 2, \dots, D_m$ e \mathcal{T} o operador de ordenação temporal [94].

A matriz $U_m(t)$ exhibe a particularidade de ser unitária, isso pode ser verificado ao mostrar que a matrix $A_m(t)$ é anti-Hermitiana. Isso é feito da seguinte forma: partindo da relação de ortonormalidade,

$$\langle \varphi_m^{(i)}; t | \varphi_m^{(j)}; t \rangle = \delta_{ij}, \quad (4.41)$$

e tomando sua derivada temporal, encontra-se

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dt} \langle \varphi_m^{(i)}; t | \varphi_m^{(j)}; t \rangle\right) &= - \langle \varphi_m^{(i)}; t | \left(\frac{d}{dt} | \varphi_m^{(j)}; t \rangle\right) \\ &= - \left(\left(\frac{d}{dt} \langle \varphi_m^{(j)}; t | \varphi_m^{(i)}; t \rangle\right) \right)^* \end{aligned} \quad (4.42)$$

Da definição de elemento de matriz feita em (4.36), a Eq. (4.42) fica

$$A_{i,j}^{(m)}(t) = - \left(A_{j,i}^{(m)}(t) \right)^*. \quad (4.43)$$

Isso mostra que a matriz $A_m(t)$ é anti-Hermitiana,

$$A_m^\dagger(t) = -A_m(t). \quad (4.44)$$

Em função disso, o conjugado Hermitiano do operador $U_{\lambda'_m, \lambda_m}^{(m)}(t)$ fica

$$U_{\lambda'_m, \lambda_m}^{\dagger(m)}(t) \equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} [e^{-\Delta t A_m^\dagger(0)} e^{-\Delta t A_m^\dagger(\Delta t)} \dots e^{-\Delta t A_m^\dagger((N-1)\Delta t)}]_{\lambda'_m, \lambda_m} \quad (4.45)$$

$$= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} [e^{\sum_{i=0}^{N-1} \Delta t A_m(i\Delta t)}]_{\lambda'_m, \lambda_m} \quad (4.46)$$

$$= \mathcal{T} \left[\exp \left(\int_0^t A_m(t') dt' \right) \right]_{\lambda'_m, \lambda_m}. \quad (4.47)$$

Tomando o produto das Eqs. (4.38) e (4.45),

$$\begin{aligned} U_{\lambda'_m, \lambda_m}^{(m)}(t) U_{\lambda_m, \lambda'_m}^{\dagger(m)}(t) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\left[e^{-\Delta t A_m((N-1)\Delta t)} \dots e^{-\Delta t A_m(\Delta t)} e^{-\Delta t A_m(0)} \right]_{\lambda'_m, \lambda_m} \times \right. \\ &\quad \left. \times \left[e^{-\Delta t A_m^\dagger(0)} e^{-\Delta t A_m^\dagger(\Delta t)} \dots e^{-\Delta t A_m^\dagger((N-1)\Delta t)} \right]_{\lambda_m, \lambda'_m} \right) \\ &= \mathbf{1}, \end{aligned} \quad (4.48)$$

mostra-se então, que $U_m(t)$ é unitário.

A definição de elemento de matriz, dada na Eq.(4.36), pode ser reescrita em função dos campos clássicos $\vec{\mathbf{R}}(t)$

$$\begin{aligned} A_{i,j}^{(m)} &= \langle \varphi_m^{(i)}; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \varphi_m^{(j)}; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle) \cdot \frac{d\vec{\mathbf{R}}}{dt} \\ &\equiv \left[\vec{A}_m(\vec{\mathbf{R}}(t)) \right]_{i,j} \cdot \frac{d\vec{\mathbf{R}}}{dt}. \end{aligned} \quad (4.49)$$

A matriz unitária $U_m(t)$, dada na Eq. (4.40), pode agora ser reescrita em função dos campos clássicos como

$$U_m(t) = \mathcal{P} \left[\exp \left(- \int_{\vec{\mathbf{R}}(0)}^{\vec{\mathbf{R}}(t)} \vec{A}_m(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} \right) \right], \quad (4.50)$$

sendo \mathcal{P} o operador de ordenação espacial [94]. Por $U_m(t)$ ser unitário, seus autovalores são fases [4]. Para uma evolução cíclica $C : \vec{\mathbf{R}}(0) \rightarrow \vec{\mathbf{R}}(t) \rightarrow \vec{\mathbf{R}}(T)$ no espaço \mathcal{M} a matriz $U_m(t)$ torna-se

$$U_m(t) = \mathcal{P} \left[\exp \left(- \oint_C \vec{A}_m(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} \right) \right]. \quad (4.51)$$

4.1.3 Comportamento da matriz $U_M(t)$ sob mudança de base

No Cap.(2), seção (2.2), foi proposta uma mudança na base de autoestados a fim de investigar o comportamento da fase geométrica. Feito isto, verificou-se o surgimento de uma transformação de calibre Abelian clássica. Com o mesmo propósito será feita uma mudança na base de autoestados do Hamiltoniano, cujo o espectro de energia é degenerado, e as mudanças decorrentes dessa nova escolha serão averiguadas.

Para cada instante existirá um conjunto completo de autoestados ortonormais de $\mathbf{H}(t)$ que formam base $\{|\Phi_n^{(\lambda_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle\}$ e dessa forma sendo válidas as relações de completudeza

$$\sum_n \sum_{\lambda_n=1}^{D_n} |\Phi_n^{(\lambda_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle \langle \Phi_n^{(\lambda_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)| = \mathbf{1}, \quad (4.52)$$

onde $\mathbf{1}$ é o operador identidade, e de ortonormalidade

$$\langle \Phi_n^{(\lambda_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t) | \Phi_m^{(\lambda_m)}; \vec{\mathbf{R}}(t) \rangle = \delta_{n,m} \delta_{\lambda_n, \lambda_m}, \quad (4.53)$$

e, Eq. de autovalor,

$$\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\Phi_n^{(\lambda_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle = E_n(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\Phi_n^{(\lambda_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle, \quad (4.54)$$

onde $\lambda_n = 1, 2, \dots, D_n$.

A correspondência entre os elementos da nova e da antiga base é feita através do operador unitário $\mathcal{U}_m(t)$, isto é,

$$\mathcal{U}_m^\dagger(t) \mathcal{U}_m(t) = \mathbf{1}, \quad (4.55)$$

e é dado por [4]

$$|\Phi_n^{(\lambda_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle = \sum_{\lambda'_n=1}^{D_n} [\mathcal{U}_n]_{\lambda_n, \lambda'_n}(\vec{\mathbf{R}}(t)) |\varphi_n^{(\lambda'_n)}; \vec{\mathbf{R}}(t)\rangle, \quad (4.56)$$

Dada a correspondência (4.56), a relação de ortonormalidade (4.53) pode ser demonstrada¹

$$\begin{aligned} \langle \Phi_n^{(\lambda_n)}; t | \Phi_m^{(\lambda_m)}; t \rangle &= \left(\sum_{\mu=1}^{D_n} [\mathcal{U}_n^\dagger(t)]_{\lambda_n, \mu} \langle \varphi_n^{(\mu)}; t | \right) \cdot \left(\sum_{\nu=1}^{D_m} [\mathcal{U}_m(t)]_{\lambda_m, \nu} |\varphi_m^{(\nu)}; t \rangle \right), \\ &= \left(\sum_{\mu=1}^{D_n} \sum_{\nu=1}^{D_m} [\mathcal{U}_n^\dagger(t)]_{\lambda_n, \mu} [\mathcal{U}_m(t)]_{\lambda_m, \nu} \underbrace{\langle \varphi_n^{(\mu)}; t | \varphi_m^{(\nu)}; t \rangle}_{= \delta_{n,m} \delta_{\mu,\nu}} \right), \\ &= \delta_{n,m} \delta_{\lambda_n, \lambda_m}. \end{aligned} \quad (4.57)$$

¹A dependência paramétrica em $\vec{\mathbf{R}}(t)$ será abreviada simplesmente pela dependência temporal t .

O vetor de estado $|\psi(0)\rangle$, na Eq. (4.31), pode ser escrito na nova base da seguinte forma

$$|\psi(0)\rangle = \sum_m \sum_m^{(\lambda'_m)} d_m^{(\lambda'_m)}(0) |\Phi_m^{(\lambda'_m)}; 0\rangle, \quad (4.58)$$

e a relação entre os coeficientes $d_m^{(\lambda'_m)}(0)$ e $c_m^{(\lambda_m)}(0)$ pode então ser encontrada

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= \sum_m \sum_{\lambda'_m=1}^{D_m} d_m^{(\lambda'_m)}(0) |\Phi_m^{(\lambda'_m)}; 0\rangle, \\ &= \sum_m \sum_{\lambda'_m=1}^{D_m} d_m^{(\lambda'_m)}(0) \left(\sum_{\lambda_m=1}^{D_m} [\mathcal{U}_m(t)]_{\lambda'_m, \lambda_m} |\varphi_m^{(\lambda_m)}; 0\rangle \right), \\ &= \sum_m \sum_{\lambda_m=1}^{D_m} \underbrace{\left(\sum_{\lambda'_m=1}^{D_m} d_m^{(\lambda'_m)}(0) [\mathcal{U}_m(t)]_{\lambda'_m, \lambda_m} \right)}_{= c_m^{(\lambda_m)}(0)} |\varphi_m^{(\lambda_m)}; 0\rangle, \end{aligned} \quad (4.59)$$

então, o coeficiente $d_m^{(\lambda'_m)}(0)$ será dado por

$$d_m^{(\lambda'_m)}(0) = \sum_{\lambda_m=1}^{D_m} c_m^{(\lambda_m)}(0) [\mathcal{U}_m^\dagger]_{\lambda'_m, \lambda_m}. \quad (4.60)$$

Na nova base, a função de onda (4.37) fica

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_m \sum_{\lambda'_m}^{D_m} d_m^{(\lambda'_m)}(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_m(t') dt'} \sum_{\lambda''_m}^{D_m} \Phi_m^{(\lambda''_m)}(\vec{x}, t) [\tilde{U}_m(t)]_{\lambda''_m, \lambda'_m}, \quad (4.61)$$

em que $\Phi_m^{(\lambda''_m)}(\vec{x}, t) \equiv \langle \vec{x} | \Phi_m^{(\lambda''_m)}; (N-1)\Delta t \rangle$, e também

$$[\tilde{U}_m(t)]_{\lambda''_m, \lambda'_m} = \mathcal{T} \left[\exp \left(- \int_0^t \tilde{A}_m(t') dt' \right) \right]_{\lambda''_m, \lambda'_m}. \quad (4.62)$$

Definindo os elementos da matriz anti-hermitiana $\tilde{A}_m(t)$ como

$$\tilde{A}_{ji}^m(t) \equiv \langle \Phi_m^{(j)}; t | \left(\frac{d}{dt} | \Phi_m^{(i)}; t \rangle \right), \quad (i, j = 1, 2, \dots, D_m). \quad (4.63)$$

e assim, observando que

$$\begin{aligned}
\tilde{A}_{ji}^m(t) &= \left(\sum_{\mu=1}^{D_m} [\mathcal{U}_m^\dagger(t)]_{j\mu} \langle \varphi_m^{(\mu)}; t | \right) \cdot \left(\frac{d}{dt} \left(\sum_{\nu=1}^{D_m} [\mathcal{U}_m(t)]_{i\nu} |\varphi_m^{(\nu)}; t \rangle \right) \right), \\
&= \left(\sum_{\mu=1}^{D_m} [\mathcal{U}_m^\dagger(t)]_{j\mu} \langle \varphi_m^{(\mu)}; t | \right) \cdot \left(\sum_{\nu=1}^{D_m} \left(\left(\frac{d}{dt} [\mathcal{U}_m(t)]_{i\nu} \right) \underbrace{\langle \varphi_m^{(\mu)}; t | \varphi_m^{(\nu)}; t \rangle}_{= \delta_{\mu,\nu}} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + [\mathcal{U}_m(t)]_{i\nu} \langle \varphi_m^{(\mu)}; t | \left(\frac{d}{dt} |\varphi_m^{(\nu)}; t \rangle \right) \right) \right), \tag{4.64}
\end{aligned}$$

com algumas simplificações,

$$\tilde{A}_{ji}^m(t) = \left(\sum_{\mu=1}^{D_m} [\mathcal{U}_m^\dagger(t)]_{j\mu} \left(\frac{d}{dt} [\mathcal{U}_m(t)]_{i\nu} \right) + \sum_{\mu=1}^{D_m} \left(\sum_{\nu=1}^{D_m} [\mathcal{U}_m^\dagger(t)]_{j\mu} A_{\mu\nu}^{(m)} [\mathcal{U}_m(t)]_{i\nu} \right) \right). \tag{4.65}$$

As matrizes $\tilde{A}_m(t)$ e $A_m(t)$, dada a transformação unitária (4.56), ficam assim relacionadas

$$\tilde{A}_m(t) = \mathcal{U}_m^\dagger(t) \left(\frac{d}{dt} \mathcal{U}_m(t) \right) + \mathcal{U}_m^\dagger(t) A_m(t) \mathcal{U}_m(t). \tag{4.66}$$

Esta é a lei de transformação de um potencial de calibre de uma teoria de calibre clássica não-Abeliana [4]. No Cap.(2), seção (2.2), constatamos que após evolução adiabática não-cíclica, dada a liberdade de calibre, poderíamos eliminar o termo de fase geométrica. O mesmo procedimento pode ser aplicado a Eq. (4.66), isto é, sempre será possível encontrar uma transformação unitária $\mathcal{U}_m(t)$ para $\tilde{A}_m(t) = 0$. Isso é feito como

$$\mathcal{U}_m^\dagger(t) \left(\frac{d}{dt} \mathcal{U}_m(t) \right) = -\mathcal{U}_m^\dagger(t) A_m(t) \mathcal{U}_m(t), \tag{4.67}$$

uma vez que $\mathcal{U}_m(t) \mathcal{U}_m^\dagger(t) = \mathbf{1}$, multiplica-se à esquerda, ambos os lados da Eq. (4.67) por $\mathcal{U}_m(t)$,

$$\frac{d}{dt} \mathcal{U}_m(t) = -A_m(t) \mathcal{U}_m(t). \tag{4.68}$$

Ao resolvermos a Eq. (4.68), encontramos

$$\mathcal{U}_m(t) = \mathcal{U}_m(0) \mathcal{T} \left[\exp \left(- \int_0^t A_m(t') dt' \right) \right]. \tag{4.69}$$

Assim como foi feito em (4.49), os elementos de matriz $\tilde{A}_{ji}^{(m)}(t)$ serão dados em função dos campos clássicos por

$$\begin{aligned}
\tilde{A}_{ji}^{(m)}(t) &= \langle \Phi_m^{(j)}; \vec{\mathbf{R}}(t) | (\vec{\nabla}_{\vec{\mathbf{R}}} | \Phi_m^{(i)}; \vec{\mathbf{R}} \rangle (t)) \cdot \frac{d\vec{\mathbf{R}}}{dt}, \\
&\equiv [\tilde{A}^{(m)}(\vec{\mathbf{R}}(t))]_{ji} \cdot \frac{d\vec{\mathbf{R}}}{dt} \tag{4.70}
\end{aligned}$$

Então, para uma evolução cíclica ($t = T$), a Eq. (4.69) torna-se

$$\mathcal{U}_m(T) = \mathcal{U}_m(0) \mathcal{P} \left[\exp \left(- \oint_C \vec{A}_m(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} \right) \right]. \quad (4.71)$$

Na Ref. [4], os autores argumentam que a Eq. (4.71) não pode ser igual ao operador unitário, fato que só pode ser encontrado ao considerarmos $\mathcal{U}_m(T) = \mathcal{U}_m(0)$, e neste caso ficamos com

$$\mathcal{P} \left[\exp \left(- \oint_C \vec{A}_m(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} \right) \right] = 1 \quad (4.72)$$

Vamos estender então a validade dos resultados obtidos no Cap.(2), seção (2.2), onde vimos que a fase de Berry não podia ser removida mediante mudança de base em sistemas de espectro não-degenerado. Neste caso em que o espectro do Hamiltoniano é degenerado, as considerações feitas no Cap. (2) continuam válidas e assim, a igualdade (4.72) não poderá ser verdadeira para um operador unitário $\mathcal{U}_m(t)$ qualquer [4].

4.2 A Representação de Heisenberg

A conexão entre as várias representações na Mecânica Quântica se dá através de transformações unitárias. Cada tipo, ou classe de representações diferem entre si na forma de tratar a evolução temporal do sistema, porém a fase de Berry sendo um resultado físico, será a mesma, independente da representação adotada.

Nesta seção serão estabelecidas as relações entre as representações de Schrödinger e Heisenberg. A função de onda $\psi(\vec{x}, t)$ quando escrita como um produto interno se mostrará a mesma em qualquer representação. Na representação de Heisenberg, sendo os vetores de estados fixos no tempo, a condição adiabática será aplicada a dinâmica dos operadores como feito na Ref. [4].

4.2.1 Fase geométrica na representação de Heisenberg

Para evitar possíveis enganos, serão feitas algumas considerações, como o uso das letras subscritas S (Schrödinger) e H (Heisenberg), em relação à convenção adotada na designação dos vetores de estado e dos operadores associados a cada representação.

Na representação de Schrödinger, a dependência temporal se manifesta nos vetores de estado e a dinâmica do sistema é governada pela equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_S = \mathbf{H}_S(t) |\psi(t)\rangle_S. \quad (4.73)$$

Como na Eq. (4.12), tomar a evolução temporal do vetor de estado $|\psi(0)\rangle_S$ implica em fazer

$$|\psi(t)\rangle_S = \mathbf{U}(t, 0) |\psi(0)\rangle_S, \quad (4.74)$$

assim, para um intervalo finito de evolução temporal, onde $t \in [0, t_N]$, o operador $\mathbf{U}(t, 0)$ poderá ser escrito, como na Eq. (4.13), como uma composição

$$\mathbf{U}(t_N, 0) = \mathbf{U}(t_N, t_{N-1})\mathbf{U}(t_{N-1}, t_{N-2}) \dots \mathbf{U}(t_2, t_1)\mathbf{U}(t_1, 0). \quad (4.75)$$

Isso é feito quando o intervalo $[0, t_N]$ é subdividido em N subintervalos de tempo de módulo Δt onde, para $N \rightarrow \infty$, tem-se $\Delta t \rightarrow 0$.

A solução da Eq. (4.73), quando $\Delta t \rightarrow 0$, é

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle_S = e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \mathbf{H}_S(t)} |\psi(t)\rangle_S, \quad (4.76)$$

e a Eq. (4.74) fica então

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_S &= \mathbf{U}(t_N, t_{N-1})\mathbf{U}(t_{N-1}, t_{N-2}) \dots \mathbf{U}(t_2, t_1)\mathbf{U}(t_1, 0) |\psi(0)\rangle_S, \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \mathbf{H}_S((N-1)\Delta t)} \dots e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \mathbf{H}_S(\Delta t)} e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \mathbf{H}_S(0)} |\psi(0)\rangle_S, \\ &= \mathcal{T} \left[\exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathbf{H}_S(t') dt' \right) \right] |\psi(0)\rangle_S, \end{aligned} \quad (4.77)$$

onde \mathcal{T} é o operador de ordenação temporal, uma vez que $[\mathbf{H}_S(t_i); \mathbf{H}_S(t_j)] \neq 0$, para $t_i \neq t_j$.

O sistema fica então perfeitamente estabelecido na representação de Schrödinger. Porém, a caracterização do sistema, originalmente na representação de Schrödinger para uma dada representação σ é feita por meio de uma transformação unitária, como também o produto escalar, isto é, $\langle \phi(t) | \mathbf{O}_S | \psi(t) \rangle_S = \langle \phi(t) | \mathbf{O}_\sigma | \psi(t) \rangle_\sigma$ deve ser independente da representação adotada.

As representações de Heisenberg e Schrödinger se conectam por meio do operador unitário $\mathbf{U}(t, 0)$. A relação entre os vetores de estado e os operadores nessas duas representações está definida como [95]

$$|\phi(t)\rangle_S = \mathbf{U}(t, 0) |\phi(t)\rangle_H \quad (4.78)$$

e

$$\mathbf{O}_S = \mathbf{U}(t, 0) \mathbf{O}_H(t) \mathbf{U}^\dagger(t, 0), \quad (4.79)$$

onde $|\phi(t)\rangle_S$ ($|\phi(t)\rangle_H$) e \mathbf{O}_S (\mathbf{O}_H) são respectivamente qualquer estado e operador na representação de Schrödinger (Heisenberg). Dada a condição inicial em que $\mathbf{U}(0, 0) = \mathbf{1}$, a correspondência entre os vetores de estado e os operadores nas Eqs. (4.78) e (4.79) claramente fica, respectivamente

$$|\phi(0)\rangle_S = |\phi(0)\rangle_H \quad (4.80)$$

e

$$\mathbf{O}_S = \mathbf{O}_H(0), \quad (4.81)$$

o que significa que as representações coincidem no instante inicial $t = 0$. O vetor de estado $|\phi(t)\rangle_H$ na Eq. (4.78), quando reescrito na forma

$$\begin{aligned} |\phi(t)\rangle_H &= \mathbf{U}^\dagger(t, 0) |\phi(t)\rangle_S \\ &= \underbrace{\mathbf{U}^\dagger(t, 0) \mathbf{U}(t, 0)}_{= 1} |\phi(0)\rangle_S \\ &= |\phi(0)\rangle_S, \end{aligned} \quad (4.82)$$

verificando-se dessa forma, que $|\phi(t)\rangle_H = |\phi(0)\rangle_H$, isto é, fixo no tempo².

Como a dependência temporal, na representação de Heisenberg, se manifesta inteiramente nos operadores, encontrar a equação que governa a dinâmica do sistema (análoga a Eq. (4.73)) implica em tomar a taxa de variação temporal do operador $\mathbf{O}_H(t)$, tal como³

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{O}_H(t) &= \frac{d}{dt} (\mathbf{U}^\dagger \mathbf{O}_S \mathbf{U}) \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}^\dagger \right) \mathbf{O}_S \mathbf{U} + \mathbf{U}^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{O}_S \right) \mathbf{U} + \mathbf{U}^\dagger \mathbf{O}_S \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} \right) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left(\underbrace{(\mathbf{U}^\dagger \mathbf{O}_S \mathbf{U})}_{= \mathbf{O}_H(t)} \underbrace{(\mathbf{U}^\dagger \mathbf{H}_S(t) \mathbf{U})}_{= \mathbf{H}_H(t)} \right) - \frac{1}{i\hbar} \left(\underbrace{(\mathbf{U}^\dagger \mathbf{H}_S(t) \mathbf{U})}_{= \mathbf{H}_H(t)} \underbrace{(\mathbf{U}^\dagger \mathbf{O}_S \mathbf{U})}_{= \mathbf{O}_H(t)} \right) + \\ &\quad + \mathbf{U}^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{O}_S \right) \mathbf{U} \end{aligned} \quad (4.83)$$

onde o último termo do lado direito da Eq. (4.83) é definido como

$$\mathbf{U}^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{O}_S \right) \mathbf{U} \equiv \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{O}_H(t). \quad (4.84)$$

Dessa forma, com alguns rearranjos, a Eq. (4.83) assume a forma conhecida da Equação de movimento de Heisenberg, dada por

$$\frac{d}{dt} \mathbf{O}_H(t) = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{O}_H(t), \mathbf{H}_H(t)] + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{O}_H(t). \quad (4.85)$$

Caso o operador \mathbf{O}_S não tenha nenhuma dependência temporal explícita, a segunda parcela do lado direito da igualdade na Eq. (4.85) será nula⁴. De modo geral, $\mathbf{H}_S(t) \neq \mathbf{H}_H(t)$ uma vez que $[\mathbf{U}(t_i), \mathbf{H}(t_j)] \neq 0$.

Em cada representação, o sistema exibe uma forma peculiar de manifestar a evolução temporal, porém grandezas como a função de onda, tomada como um produto interno, deve ser

²Mesmo sendo o operador Hamiltoniano dependente do tempo.

³A dependência temporal do operador unitário \mathbf{U} foi omitida com o propósito de não sobrecarregar a notação.

⁴Neste caso, a estrutura da equação de movimento de Heisenberg é similar a equação de movimento clássica de uma variável \mathbf{O} que não depende explicitamente do tempo, tal que $\frac{d}{dt} \mathbf{O} = \{\mathbf{O}, \mathbf{H}\}$, onde $\{\mathbf{O}, \mathbf{H}\}$ é o parêntesis de Poisson entre \mathbf{O} e \mathbf{H} [95].

invariante, independente da representação adotada. Antes de fazer essa verificação, faz-se necessário introduzir o conjunto de bases do espaço das coordenadas de posição, $\{|\vec{x}; t\rangle_H\}$ e $\{|\vec{x}\rangle_S\}$ associadas respectivamente a cada representação, de Heisenberg e de Schrödinger. A equação de autovalor do operador de posição para cada representação é

$$\mathbf{X}_H(t) |\vec{x}; t\rangle_H = \vec{x} |\vec{x}; t\rangle_H \quad (4.86)$$

e

$$\mathbf{X}_S |\vec{x}\rangle_S = \vec{x} |\vec{x}\rangle_S, \quad (4.87)$$

em que o vetor de estado $|\vec{x}; t\rangle_H$, a partir da Eq. (4.78), se conecta ao estado $|\vec{x}\rangle_S$ da seguinte forma

$$\begin{aligned} |\vec{x}; t\rangle_H &= \mathbf{U}^\dagger(t, 0) |\vec{x}\rangle_S \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_S(0)} e^{\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_S(\Delta t)} \dots e^{\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_S((N-1)\Delta t)} |\vec{x}\rangle_S \\ &= \mathcal{T}^{-1} \left[\exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathbf{H}_S(t') dt' \right) \right] |\vec{x}\rangle_S. \end{aligned} \quad (4.88)$$

A função de onda poderá agora ser escrita independente da representação

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle_S \\ &= \langle \vec{x} | \mathbf{U}(t, 0) | \psi(0) \rangle_S \\ &= \langle \vec{x}; t | \psi \rangle_H, \end{aligned} \quad (4.89)$$

ou ainda, de forma alternativa

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= \langle \vec{x}; t | \psi \rangle_H \\ &= \langle \vec{x} | \left[\mathcal{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathbf{H}_S(t') dt' \right) \right] | \psi(0) \rangle_S. \end{aligned} \quad (4.90)$$

Na representação de Heisenberg, a condição adiabática se manifestará sobre a dinâmica dos operadores, dada sua dependência temporal. Da relação que conecta os operadores na Eq. (4.79), tem-se que,

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_H(t) &= \mathbf{U}^\dagger(t, 0) \mathbf{O}_S \mathbf{U}(t, 0) \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_S(0)} \dots e^{\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_S((N-1)\Delta t)} \mathbf{O}_S e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_S((N-1)\Delta t)} \dots e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t \mathbf{H}_S(0)}; \end{aligned} \quad (4.91)$$

no caso mais geral em que o operador Hamiltoniano possui o espectro de autovalores de energia degenerado, em cada instante existirá uma base $\{|\varphi_n^{(\lambda_n)}; t\rangle_S\}$ de autoestados de $\mathbf{H}_S(t)$. Nota-se na Eq. (4.91) que o operador Hamiltoniano na representação de Schrödinger ainda se faz presente (em cada exponencial). A fim de eliminar essa dependência, $2N$ operadores identidade (ver Eq.(4.28)) serão adicionados, um entre cada instante $t_j = j \Delta t$ (com $j = 0, 1, \dots, N - 1$) dessa equação.

Como feito anteriormente (ver seção (4.1), subseção (4.1.2)) o teorema adiabático será aplicado ao produto escalar, $\langle \varphi_{n_j}^{(\lambda_{n_j})}; j\Delta t | e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}_S(t)(j\Delta t)} | \varphi_{n_{j+1}}^{(\lambda_{n_{j+1}})}; (j+1)\Delta t \rangle$, e no limite adiabático ($T \rightarrow \infty$) a evolução de qualquer operador na representação de Heisenberg fica [4]

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_H(t) = & \sum_{n,m} \sum_{\lambda_n^{(1)}, \lambda_n^{(2)}=1}^{D_n} \sum_{\lambda_m^{(1)}, \lambda_m^{(2)}=1}^{D_m} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t (E_n(t') - E_m(t')) dt'\right) |\varphi_n^{(\lambda_n^{(1)})}; 0\rangle_S \langle \varphi_m^{(\lambda_m^{(1)})}; 0| \times \\ & \times \left[\mathcal{P} \left(\exp \left(- \int_C \vec{A}_n(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} \right) \right) \right]_{\lambda_n^{(1)}, \lambda_n^{(2)}}^\dagger O_{\lambda_n^{(2)}, \lambda_m^{(2)}}(t) \times \\ & \times \left[\mathcal{P} \left(\exp \left(- \int_C \vec{A}_m(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} \right) \right) \right]_{\lambda_m^{(2)}, \lambda_m^{(1)}} \end{aligned} \quad (4.92)$$

onde as matrizes $\vec{A}_\mu(\vec{\mathbf{R}})$, com $\mu = n, m$, foram definidas na Eq. (4.49) e com elemento de matriz dado por

$$O_{\lambda_n, \lambda_m}(t) \equiv {}_S \langle \varphi_n^{(\lambda_n)}; t | \mathbf{O}_S | \varphi_m^{(\lambda_m)}; t \rangle_S . \quad (4.93)$$

O caso não degenerado será obtido a partir da Eq. (4.92) ao fazer $D_n = D_m = 1$.

Na Ref. [96], Yves Brihaye e Piotr Kosiński também discutem sobre a aproximação adiabática e a fase de Berry no âmbito da representação de Heisenberg. Neste trabalho, a assim chamada representação de Heisenberg adiabática é definida como a representação de Heisenberg que reproduz o comportamento temporal dos valores esperados dados pela aproximação adiabática na representação de Schrödinger, como discutido brevemente nessa seção.

Capítulo 5

EFEITO AHARONOV-BOHM DUAL

O trabalho pioneiro que discutia os efeitos locais dos potenciais eletromagnéticos surgiu em 1948, um esforço conjunto de Ehrenberg e Siday [97]. Aproximadamente uma década depois, em 1959, Y. Aharonov e D. Bohm, em coautoria no artigo [1] "*Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory*", investigaram a influência dos potenciais eletromagnéticos em regiões livres de campos ao analisar o padrão de interferência de partículas carregadas na presença de um solenóide (com fluxo de campo em seu interior, região inacessível a partícula) e demonstraram que, em virtude disso, a função de onda das partículas adquirem uma fase topológica quântica diretamente associada ao potencial vetor. Uma parte da comunidade de físicos da época enxergou neste fenômeno um paradoxo. Esse espanto, vem do fato do sistema quântico residir em uma região do espaço onde não existe campo magnético \vec{B} (e/ou elétrico \vec{E}) e, dessa forma, não havendo forças que modificassem sua dinâmica.

No eletromagnetismo clássico, os campos são quantidades mensuráveis e o conceito de força é fundamental, enquanto que os potenciais são meras construções matemáticas sujeitas a transformações de calibre. Porém, ao tratar a dinâmica de sistemas quânticos, a Equação de Schrödinger não envolve forças e campos e é necessariamente expressa em termos dos potenciais vetor e/ou escalar, o que os eleva ao status de quantidades fundamentais.

A partir de 1960, com o trabalho de Shambers [98] dá-se início à uma série de verificações experimentais do Efeito Aharonov-Bohm. O caso em que é empregado um solenóide (suposto) infinito tem sido largamente explorado em estudos teóricos [99–101]. No entanto, reproduzir um solenóide infinito implica em sérias dificuldades práticas, uma vez que o campo magnético \vec{B} não pode ser completamente confinado em seu interior.

A fim de evitar esse impasse, Tonomura *et al* [102–104] empregaram magnetos toroidais, que confinassem o campo magnético em seu interior, em seus estudos experimentais. Uma análise matemática rigorosa do Efeito Aharonov-Bohm com magnetos toroidais dadas as condições experimentais de Tonomura *et al* [102–104] é feita por Miguel Ballesteros e Ricardo Weder [105].

Em 1984, Aharonov e Casher [106] investigaram a dinâmica quântica de um dipólo

magnético na presença de uma densidade linear de cargas elétricas e verificaram o surgimento de uma segunda fase topológica quântica nesta dinâmica. A esse fenômeno deu-se o nome de Efeito Aharonov-Casher (AC) e reproduções experimentais que o comprovassem foram realizadas com interferômetro de nêutrons [107], interferômetros Ramsey ou Ramsey-Bordé com átomos e moléculas [108–112] e recentemente com interferômetros usando átomos de lítio [113].

He e Mckellar [114] em 1993 e Wilkens [115] de forma independente em 1994, previram a existência de uma terceira fase topológica quântica, adquirida por um dipolo elétrico, quando circulado em torno e em paralelo, a uma densidade linear de cargas (monopolos) magnéticos. Na literatura, essa fase é conhecida por fase He-Mckellar-Wilkens (HMW), que por sua vez é essencialmente a transformação (de Maxwell) dual da fase AC. Uma configuração experimental prática foi proposta por Wei, Han e Wei [116] para verificar essa fase.

Medidas recentes da fase HMW também foram realizadas [117, 118]. Nos últimos anos, He e Meckellar estudaram uma série de efeitos duais em Mecânica Quântica e Teoria de Campo [119, 120]. Ericsson e Sjosqvist [121] estudaram, do ponto de vista da dualidade Aharonov-Casher, um efeito dual dos níveis de Landau e discutiram uma possível aplicação em condensados de Bose-Einstein. Observações de fases topológicas também aparecem quando Anandan [122] fornece um tratamento unificado e totalmente relativístico da interação entre momentos de dipólo elétrico e magnético de uma partícula e um campo eletromagnético.

Dowling, Williams e Franson [7] propuseram uma descrição unificada de todos os três fenômenos (AB, AC e HMW) discutindo a relação de dualidade eletromagnética de Maxwell entre as três fases quânticas. Eles estudaram o efeito AB usando as transformações de dualidade de Maxwell e propuseram um quarto fenômeno, o efeito Aharonov-Bohm dual (ABd) e obtendo assim, a fase quântica ABd. C. Furtado e G. Duarte [6], analisaram o efeito ABd em detalhes. Eles construíram a lagrangeana que representava o sistema físico e por meio de uma análise do fenômeno extraíram todas as informações relevantes ao problema.

Neste capítulo, será investigada a dinâmica quântica de um monopolo magnético na presença de um solenóide elétrico linear que gera fluxo de campo elétrico (confinado no interior do solenóide). O Efeito Aharonov-Bohm dual será analisado e discutido sob a ótica das transformações de dualidade e a lagrangeana que representa esse sistema físico será obtida. O experimento de interferência por fenda dupla será estudado na presença de um potencial vetor elétrico. Por fim, demonstra-se o surgimento da fase de Berry.

5.1 O potencial vetor dual

Monopolos magnéticos ou monopolos de Dirac, são partículas que comportam-se como pólos isolados, norte ou sul, e foram objetos de especulação desde os primeiros estudos detalhados sobre campos magnéticos há tempos atrás [123]. A ocorrência de cargas magnéticas pontuais na natureza poderia elucidar um dos maiores mistérios da Física contemporânea no que diz respeito a quantização da carga elétrica, conforme demonstrou P.

A. M. Dirac [16] em 1931. Nesse trabalho, Dirac combina argumentos da mecânica quântica e da eletrodinâmica clássica e identifica os potenciais eletromagnéticos consistentes com a existência dos monopolos.

Apesar de nenhuma observação experimental direta até então, análogos de monopolos magnéticos foram encontrados em gelos de spin exóticos [124, 125] e em outros sistemas [126–128]. Porém, em 2014, com o trabalho "Observation of Dirac monopoles in a synthetic magnetic field", M. W. Ray *et al* [129] demonstraram a criação controlada [130] de monopolos de Dirac por um campo magnético sintético produzido por um condensado spinorial de Bose-Einstein. De acordo com os próprios autores, os resultados obtidos na Ref. [129] oferecem uma oportunidade sem precedentes para observar e manipular essas entidades quânticas em um ambiente controlado.

Ao admitirmos a existência de cargas (monopolos) magnéticas, as equações de Maxwell (em sua versão diferencial), assumem uma forma simétrica, tal como [131]:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{E}} = 4\pi\rho_e, \quad (5.1)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{B}} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \vec{\mathbf{j}}_e, \quad (5.2)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{B}} = 4\pi\rho_m, \quad (5.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{E}} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t} = -\frac{4\pi}{c} \vec{\mathbf{j}}_m \quad (5.4)$$

onde a velocidade da luz no vácuo é dada por $c = \sqrt{\frac{1}{\mu_0\epsilon_0}}$. Por definição as densidades de corrente elétrica e magnética são $\vec{\mathbf{j}}_e$ e $\vec{\mathbf{j}}_m$, e as densidades volumétricas de cargas são ρ_e e ρ_m , respectivamente.

Uma consequência das leis da eletrodinâmica é a conservação local da carga, que neste caso é elétrica e magnética. Dessa forma, aplicando a divergência na Eq. (5.4) tem-se que,

$$\begin{aligned} \underbrace{\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{E}})}_{=0} + \frac{1}{c} \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t} \right) &= -\frac{4\pi}{c} (\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{j}}_m), \\ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{(\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{B}})}_{=4\pi\rho_m} &= \frac{4\pi}{c} (\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{j}}_m), \\ \frac{\partial \rho_m}{\partial t} &= -(\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{j}}_m), \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{j}}_m + \frac{\partial \rho_m}{\partial t} &= 0. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Essa, é a equação da continuidade (sem termos de fontes) para a carga magnética. A carga elétrica também apresenta uma equação semelhante, obtida de forma análoga a Eq. (5.5) ao

aplicar a divergência na Eq. (5.2), ficando por fim,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_e + \frac{\partial \rho_e}{\partial t} = 0. \quad (5.6)$$

As leis de conservação de energia e momento também podem ser aplicadas para distribuições de cargas e correntes magnéticas, analogamente ao que foi feito na Ref. [131] para distribuições de cargas e correntes elétricas.

Ao tratar o efeito Aharonov-Bohm do ponto de vista das transformações de dualidade, obtém-se o efeito Aharonov-Bohm dual. Portanto, se faz necessário esboçar as relações de transformação de dualidade entre as grandezas (campos, cargas, correntes, etc) elétricas (ζ_e) e magnéticas (ζ_m). Na forma de uma matriz isso se traduz como [132],

$$\begin{pmatrix} \zeta_e \\ \zeta_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta'_e \\ \zeta'_m \end{pmatrix}, \quad (5.7)$$

sendo θ o ângulo definido no espaço por $\vec{\mathbf{E}}$ e $\vec{\mathbf{B}}^1$. A relação entre as grandezas com linha e sem linha é dada pela matriz de transformação

$$\Xi_{\zeta', \zeta} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}, \quad (5.8)$$

que por sua vez, é uma matriz ortogonal, isto é, $\Xi^{-1} = \Xi^T$. Com isso, a transformação inversa da Eq. (5.7) pode ser obtida com

$$\begin{pmatrix} \zeta'_e \\ \zeta'_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta_e \\ \zeta_m \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$

A forma matricial (5.7) pode ser explicitamente representada pelo conjunto de equações que versam grandezas elétricas ($\rho_e, \vec{j}_e, \vec{\mathbf{E}}$) e magnéticas ($\rho_m, \vec{j}_m, \vec{\mathbf{B}}$)

$$\zeta_e = (\zeta'_e \cos(\theta) + \zeta'_m \sin(\theta)) \Rightarrow \begin{cases} \rho_e = (\rho'_e \cos(\theta) + \rho'_m \sin(\theta)) \\ \vec{j}_e = (\vec{j}'_e \cos(\theta) + \vec{j}'_m \sin(\theta)) \\ \vec{\mathbf{E}} = (\vec{\mathbf{E}}' \cos(\theta) + \vec{\mathbf{B}}' \sin(\theta)) \end{cases}, \quad (5.10)$$

e também por

$$\zeta_m = (-\zeta'_e \sin(\theta) + \zeta'_m \cos(\theta)) \Rightarrow \begin{cases} \rho_m = (-\rho'_e \sin(\theta) + \rho'_m \cos(\theta)) \\ \vec{j}_m = (-\vec{j}'_e \sin(\theta) + \vec{j}'_m \cos(\theta)) \\ \vec{\mathbf{B}} = (-\vec{\mathbf{E}}' \sin(\theta) + \vec{\mathbf{B}}' \cos(\theta)) \end{cases}. \quad (5.11)$$

As Eqs. de Maxwell (5.1, 5.2, 5.3, 5.4) são invariantes quando sujeitas as transformações

¹No caso em questão, $\theta = \frac{\pi}{2}$.

de dualidade (5.10) e (5.11). Essa verificação pode ser encontrada no excelente material apresentado na Ref. [132]. Para $\theta = \frac{\pi}{2}$ as transformações (5.10) e (5.11) levam às seguintes relações de correspondência entre as grandezas elétricas (GE) e magnéticas (GM), conhecidas também por transformações de Heaviside [6]

TRANSFORMAÇÕES DE HEAVISIDE

Tabela 5.1. (a) Correspondência entre as grandezas eletromagnéticas associadas as Eqs. (5.11). (b) Correspondência entre as grandezas eletromagnéticas associadas as Eqs. (5.10).

GM	↔	GE
g	→	q
\vec{J}_m	→	$-\vec{J}_e$
\vec{B}	→	$-\vec{E}$

(a)

GE	↔	GM
q	→	g
\vec{J}_e	→	\vec{J}_m
\vec{E}	→	\vec{B}

(b)

sendo q e g respectivamente, as cargas elétricas e magnéticas. Nas referências [6, 7] convencionou-se a carga g como o pólo norte magnético.

Ao desconsiderar a presença de cargas (densidades) elétricas (ρ_e, \vec{J}_e) nas Eqs. (5.1) e (5.2), uma nova configuração física é criada: a magnetodinâmica [133]. Assim, as Eqs. de Maxwell assumem agora a seguinte forma:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0, \quad (5.12)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = 0, \quad (5.13)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 4\pi\rho_m, \quad (5.14)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\frac{4\pi}{c} \vec{J}_m. \quad (5.15)$$

Nesta situação em particular, como o $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$, consequentemente é possível definir um potencial vetor elétrico, dual em relação ao potencial vetor magnético \vec{A}_m , de tal forma que o campo elétrico possa ser escrito como,

$$\vec{E} = \vec{\nabla} \times \vec{A}_e. \quad (5.16)$$

Ao tomar a Eq. (5.16) na Eq. (5.13) encontra-se

$$\vec{\nabla} \times \left(\vec{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}_e}{\partial t} \right) = 0, \quad (5.17)$$

e para que essa igualdade seja matematicamente consistente, o termo entre parênteses pode

ser definido por,

$$-\nabla\phi_m \equiv \vec{\mathbf{B}} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathbf{A}}_e}{\partial t}, \quad (5.18)$$

sendo ϕ_m o potencial escalar magnético. Assim, o campo magnético $\vec{\mathbf{B}}$ pode ser escrito de forma mais conveniente em função dos potenciais escalar (ϕ_m) e vetorial ($\vec{\mathbf{A}}_e$) como

$$\vec{\mathbf{B}} = -\nabla\phi_m + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathbf{A}}_e}{\partial t}. \quad (5.19)$$

Partindo agora para uma situação física idealizada em que se admite a existência de um solenóide de comprimento infinito e de raio R (muito pequeno), alinhado ao eixo cartesiano z (\hat{e}_z). Assim como na Ref. [7], o solenóide também pode ser entendido como um tubo onde em seu interior existe uma distribuição linear de dipólos elétricos (designados por $\vec{\mathbf{d}}$), como esboçado na figura (5.1).

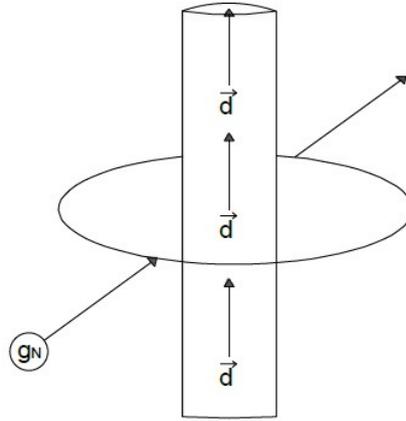


Figura 5.1. Fluxo de dipólos elétricos no interior do solenóide - adaptado da Ref. [7].

O campo elétrico do solenóide é dado por

$$\vec{\mathbf{E}} = \begin{cases} E_0 \hat{e}_z, & r \leq R \\ 0, & r > R, \end{cases} \quad (5.20)$$

isto é, o campo elétrico está totalmente confinado ao interior do solenóide. Para encontrar o fluxo, considerando a Eq. (5.16), basta tomar a integral de superfície,

$$\begin{aligned} \Phi_e &= \iint_S \vec{\mathbf{E}} \cdot \hat{e}_z ds \\ &= \iint_S (\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{A}}_e) \cdot \hat{e}_z ds. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Mesmo que o campo elétrico seja nulo para $r > R$, isso não descarta a possibilidade de que o potencial $\vec{\mathbf{A}}_e$ seja diferente de zero nessa região. Aplicando o teorema de Stokes na Eq. (5.21)

tem-se,

$$\oint_C \vec{A}_e \cdot d\vec{x} = \iint_S (\vec{\nabla} \times \vec{A}_e) \cdot \hat{e}_z ds, \quad (5.22)$$

sendo $\vec{A}_e = A_e \hat{e}_\varphi$, e \hat{e}_φ o vetor unitário na direção do ângulo azimutal crescente. Logo, para todo o espaço, o potencial vetor \vec{A}_e , pode ser dado por:

$$\vec{A}_e = \begin{cases} \frac{E_0 r}{2} \hat{e}_\varphi, & r \leq R \\ \frac{E_0 R^2}{2r} \hat{e}_\varphi, & r > R, \end{cases} \quad (5.23)$$

e dessa forma, para $r > R$, o potencial vetor \vec{A}_e pode ser escrito em função do fluxo no interior do solenóide como

$$\begin{aligned} \oint_C \vec{A}_e \cdot d\vec{x} &= \Phi_e \\ \vec{A}_e &= \frac{\Phi_e}{2\pi r} \hat{e}_\varphi. \end{aligned} \quad (5.24)$$

A Eq. (5.24) é versão dual daquela encontrada na Ref. [100], onde Berry analisa o efeito Aharonov-Bohm fazendo uso do método do fator de fase de Dirac, dadas as mesmas condições físicas idealizadas para o solenóide. Do ponto de vista das transformações de dualidade, os potenciais vetor elétrico \vec{A}_e e magnético \vec{A}_m , estão relacionados pela transformação: $\vec{A}_e \rightarrow \vec{A}_m$ e $\vec{A}_m \rightarrow -\vec{A}_e$. Estas sendo válidas, uma vez consideradas o conjunto de transformações para campos e cargas.

Estudos que tratam do potencial vetor elétrico podem ser encontrados em [134, 135]. Afanasiev [136], com o uso do potencial vetor elétrico, tratou de solenóides elétricos estáticos e não estáticos. Yamashita e Tomiooshi [137] usaram o potencial vetor elétrico no estudo do efeito Aharonov-Bohm ao tratar a dinâmica de fluxons em anéis bi-dimensionais.

Na Ref. [138] é apresentada uma revisão e discussão do significado físico do potencial vetor no eletromagnetismo por meio de um experimento análogo ao descrito neste capítulo, em que um campo magnético² é gerado por um solenóide "infinitamente" longo (ou alternativamente por uma distribuição de corrente toroidal). O campo magnético é confinado no interior do solenóide (ou no toro) sendo nulo fora dele. No entanto, um anel metálico de resistência uniforme é disposto fora do solenóide (região livre de campo magnético) e concêntrico ao seu eixo. Sobre o anel metálico é produzida uma força eletromotriz (fem), gerada pela taxa de variação temporal do fluxo de campo dentro do solenóide, sendo o potencial vetor o agente direto sobre as cargas no anel produzindo assim uma corrente sobre ele. Nessa referência, também é feita uma breve discussão acerca do deslocamento de fase gerado pelo efeito Aharonov-Bohm.

²Neste caso, o campo é lentamente dependente do tempo, porém considera-se em boa aproximação o campo magnético uniforme uma vez que o solenóide é muito longo.

5.2 A dinâmica quântica

Afim de investigar a dinâmica quântica de um monopolo magnético na presença de um solenóide elétrico, se faz necessário encontrar o operador Hamiltoniano que de forma apropriada, possa descrever esse sistema. Para este fim, a Lagrangiana clássica dual do sistema também será determinada.

Classicamente, a força experimentada por um monopolo magnético g em movimento num campo eletromagnético externo é a própria força de Lorentz em sua versão dual [6,123],

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{F}} &= m \frac{d^2 \vec{\mathbf{x}}}{dt^2} \\ &= g \left[\vec{\mathbf{B}} - \left(\frac{1}{c} \dot{\vec{\mathbf{x}}} \times \vec{\mathbf{E}} \right) \right],\end{aligned}\quad (5.25)$$

onde m é a massa do monopolo magnético. Como as Eqs. de Maxwell permitem escrever os campos elétrico e magnético em função dos potenciais escalar ϕ_m e vetorial $\vec{\mathbf{A}}_e$, tal como nas equações (5.16) e (5.19), a Eq. (5.25) pode então ser reescrita como

$$\vec{\mathbf{F}} = g \left[(-\nabla \phi_m + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{\mathbf{A}}_e}{\partial t}) - \frac{1}{c} \dot{\vec{\mathbf{x}}} \times (\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{A}}_e) \right], \quad (5.26)$$

uma vez que $\vec{\mathbf{A}}_e = \vec{\mathbf{A}}_e(\vec{\mathbf{x}}, t)$, nota-se que sua derivada total em relação ao tempo é

$$\begin{aligned}\frac{d\vec{\mathbf{A}}_e}{dt} &= \frac{\partial \vec{\mathbf{A}}_e}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial \vec{\mathbf{A}}_e}{\partial y} \dot{y} + \frac{\partial \vec{\mathbf{A}}_e}{\partial z} \dot{z} + \frac{\partial \vec{\mathbf{A}}_e}{\partial t} \\ &= (\dot{\vec{\mathbf{x}}} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\mathbf{A}}_e + \frac{\partial \vec{\mathbf{A}}_e}{\partial t},\end{aligned}\quad (5.27)$$

e ainda usando a igualdade

$$\dot{\vec{\mathbf{x}}} \times (\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{A}}_e) = \nabla (\dot{\vec{\mathbf{x}}} \cdot \vec{\mathbf{A}}_e) - (\dot{\vec{\mathbf{x}}} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\mathbf{A}}_e, \quad (5.28)$$

consciente de que o operador diferencial nabla afeta apenas as coordenadas de posição³, a Eq. (5.26) se reduz a

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{F}} &= g \left[-\nabla \phi_m + \frac{1}{c} \left(\frac{d\vec{\mathbf{A}}_e}{dt} - (\dot{\vec{\mathbf{x}}} \cdot \nabla) \vec{\mathbf{A}}_e \right) - \frac{1}{c} (\nabla (\dot{\vec{\mathbf{x}}} \cdot \vec{\mathbf{A}}_e) - (\dot{\vec{\mathbf{x}}} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\mathbf{A}}_e) \right] \\ &= -\nabla \left(g \phi_m + \frac{g}{c} (\dot{\vec{\mathbf{x}}} \cdot \vec{\mathbf{A}}_e) \right) + \frac{g}{c} \frac{d\vec{\mathbf{A}}_e}{dt}.\end{aligned}\quad (5.29)$$

Quando as coordenadas generalizadas (de posição (q_i) e velocidade (\dot{q}_i)) são utilizadas como as próprias coordenadas cartesianas do monopolo, as componentes da força generalizada⁴,

³Em geral vale a identidade $\nabla (\vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}}) = (\vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\mathbf{b}} + (\vec{\mathbf{b}} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\mathbf{a}} + \vec{\mathbf{a}} \times (\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{b}}) + \vec{\mathbf{b}} \times (\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{a}})$ [139].

⁴Neste caso, as forças generalizadas advêm de funções do tipo $U(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n, t)$, chamadas de potenciais generalizados ou potenciais dependentes das velocidades, por meio da Eq. (5.30) [139].

são dadas por

$$F_i = -\frac{\partial U}{\partial q_i} + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial U}{\partial \dot{q}_i} \right), \quad (5.30)$$

e coincidem com as componentes cartesianas da força de Lorentz dual. Com o uso do operador $\vec{\nabla}_v = \partial/\partial \dot{x} \hat{e}_i + \partial/\partial \dot{y} \hat{e}_j + \partial/\partial \dot{z} \hat{e}_k$, e considerando que as coordenadas de posição e velocidades generalizadas são tratadas como quantidades independentes [139], a Eq. (5.29) fica

$$\vec{F} = -\nabla \left(g\phi_m + \frac{g}{c} (\dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}_e) \right) + \frac{d}{dt} \left[\nabla_v \left(g\phi_m + \frac{g}{c} (\dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}_e) \right) \right], \quad (5.31)$$

pois ϕ_m e \vec{A}_e independem da velocidade.

Fazendo uma inspeção direta ao comparar as equações (5.30) e (5.31) nota-se que a energia potencial do sistema se revela como

$$U = g \left(\phi_m + \frac{1}{c} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}_e \right). \quad (5.32)$$

Define-se a função de Lagrange ou, simplesmente, Lagrangiana L por

$$L = T - U, \quad (5.33)$$

onde T é a energia cinética do monopolo, dada por

$$T = \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2. \quad (5.34)$$

A Lagrangiana clássica de um monopolo magnético na presença de um campo eletromagnético externo pode agora ser escrita como

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 - g \left(\phi_m + \frac{1}{c} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}_e \right). \quad (5.35)$$

Ao fazer uma transformação de calibre para os potenciais, do tipo $\vec{A}'_e = \vec{A}_e - \nabla \alpha$ e $\phi'_m = \phi_m - \frac{1}{c} \frac{\partial \alpha}{\partial t}$, onde $\alpha(\vec{x}, t)$ é uma função arbitrária, a Lagrangiana (5.35) transforma-se da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} L' &= \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 - g \left(\phi'_m + \frac{1}{c} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}'_e \right) \\ &= \frac{1}{2} m \dot{\vec{x}}^2 - g \left(\phi_m + \frac{1}{c} \dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}_e \right) + \frac{g}{c} \left(\dot{\vec{x}} \cdot \nabla \alpha + \frac{\partial \alpha}{\partial t} \right) \\ &= L + \frac{g}{c} \frac{d\alpha}{dt}. \end{aligned} \quad (5.36)$$

As lagrangianas $L'(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t)$ e $L(\vec{x}, \dot{\vec{x}}, t)$ são chamadas de equivalentes, já que diferem entre si por uma derivada total em relação ao tempo de uma função arbitrária $\alpha(\vec{x}, t)$. O princípio de Hamilton, também chamado de princípio de mínima ação, tem como importante consequência o fato de Lagrangianas equivalentes levarem as mesmas equações de movimento. Isso pode

ser verificado ao considerar a ação S' associada a lagrangiana L' , tal como [139]

$$\begin{aligned}
 S' &= \int_{t_1}^{t_2} L' dt \\
 &= \int_{t_1}^{t_2} L dt + \frac{g}{c} \int_{t_1}^{t_2} \frac{d\alpha}{dt} dt \\
 &= S + \frac{g}{c} [\alpha(\vec{x}(t_2), t_2) - \alpha(\vec{x}(t_1), t_1)] .
 \end{aligned} \tag{5.37}$$

Como a variação da ação mantém os extremos $\vec{x}(t_2)$ e $\vec{x}(t_1)$ fixos, $\delta S' = \delta S$. E assim, as condições $\delta S' = 0$ e $\delta S = 0$ são idênticas. Isso mostra que os potenciais (\vec{A}_e, ϕ_e) e (\vec{A}'_e, ϕ'_e) produzem as mesmas consequências físicas (classicamente). Ao considerar a ausência de fontes de campo magnético a dinâmica clássica se restringirá ao movimento do monopolo na presença do campo elétrico.

A Hamiltoniana não relativística clássica da partícula é dada, em virtude das transformação de Legendre, pela equação

$$H = \vec{P} \cdot \dot{\vec{x}} - L, \tag{5.38}$$

sendo \vec{P} o chamado momento canônico, o qual pode ser obtido a partir da Eq. (5.35) ao fazer

$$\begin{aligned}
 \vec{P} &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{x}}} \\
 &= m\dot{\vec{x}} - \frac{g}{c} \vec{A}_e .
 \end{aligned} \tag{5.39}$$

O termo de velocidade (generalizada) pode ser colocado em função do momento canônico,

$$\dot{\vec{x}} = \frac{1}{m} \left(\vec{P} + \frac{g}{c} \vec{A}_e \right). \tag{5.40}$$

A hamiltoniana que descreve a dinâmica de um monopolo magnético na presença de campos eletromagnéticos, dada pela Eq. (5.38), pode ser reescrita de maneira mais conveniente,

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{\vec{P}}{m} \cdot \left(\frac{1}{2m} \vec{P} + \frac{g}{c} \vec{A}_e \right) - \left[\frac{1}{2m} \left(\vec{P} + \frac{g}{c} \vec{A}_e \right)^2 - g \left(\phi_m + \frac{1}{mc} \left(\vec{P} + \frac{g}{c} \vec{A}_e \right) \cdot \vec{A}_e \right) \right] \\
 &= \frac{1}{2m} \left(\vec{P} + \frac{g}{c} \vec{A}_e \right)^2 + g\phi_m .
 \end{aligned} \tag{5.41}$$

Uma forma segura de verificar se todo argumento matemático dado até aqui é consistente, é considerar as equações de Hamilton ou equações canônicas de Hamilton, que se apresentam sob a forma

$$\dot{\vec{x}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{P}} \tag{5.42}$$

e

$$\dot{\vec{P}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}}, \tag{5.43}$$

e encontrar a equação do movimento da partícula. Isso pode ser feito uma vez que

$$\dot{\vec{x}} = \frac{1}{m} \left(\vec{P} + \frac{g}{c} \vec{A}_e \right) \quad (5.44)$$

e

$$\dot{\vec{P}} = -\frac{1}{2m} \left[\vec{\nabla} \left(\left(\vec{P} + \frac{g}{c} \vec{A}_e \right) \cdot \left(\vec{P} + \frac{g}{c} \vec{A}_e \right) \right) \right] + g \nabla \phi_m. \quad (5.45)$$

Usando a seguinte propriedade $\nabla (\vec{\Pi} \cdot \vec{\Pi}) = 2 (\vec{\Pi} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\Pi} + 2 \vec{\Pi} \times (\vec{\nabla} \times \vec{\Pi})$, com $\vec{\Pi} = \left(\vec{P} + \frac{g}{c} \vec{A}_e \right)$, o cálculo de $\dot{\vec{P}}$ segue como

$$\begin{aligned} \dot{\vec{P}} &= -\frac{1}{2m} \left[\vec{\nabla} \left(\left(\vec{P} + \frac{g}{c} \vec{A}_e \right) \cdot \left(\vec{P} + \frac{g}{c} \vec{A}_e \right) \right) \right] + g \nabla \phi_m \\ &= -\frac{g}{mc} \left[\left(\vec{P} + \frac{g}{c} \vec{A}_e \right) (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}_e) + \left(\vec{P} + \frac{g}{c} \vec{A}_e \right) \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}_e) \right] + g \nabla \phi_m \\ &= \frac{g}{c} \left[\dot{\vec{x}} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}_e) + \dot{\vec{x}} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}_e) \right] + g \nabla \phi_m. \end{aligned} \quad (5.46)$$

Com a ajuda da identidade (5.27), essa equação pode ser expressa em função dos campos \vec{B} e \vec{E} , tornando-se por fim

$$\begin{aligned} \vec{F} &= m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} \\ &= g \left[\vec{B} - \left(\frac{1}{c} \dot{\vec{x}} \times \vec{E} \right) \right], \end{aligned} \quad (5.47)$$

isto é, a já esperada força de Lorentz dual.

A dinâmica quântica do sistema inicialmente proposto fica perfeitamente representada ao se admitir a versão quântica da Hamiltoniana (5.41). A partir disso, é possível esboçar a equação de Schrödinger dependente do tempo

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} + \frac{g}{c} \vec{A}_e \right)^2 + \mathbf{V}(\vec{x}, t) \right] \Psi(\vec{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t), \quad (5.48)$$

onde $\mathbf{V}(\vec{x}, t)$ é o operador associado a energia potencial da partícula que, eventualmente, pode incluir a contribuição magnética $g\phi_m$. Aqui existe uma sutileza: para encontrar a Eq. (5.41) foi necessário partir do pressuposto de que o monopolo estava na presença de campos eletromagnéticos, o que justificava a ação da força de Lorentz dual sobre a partícula. Porém, ao adotar a sua versão quântica à realidade física do problema abordado, nota-se que na região onde se encontra a partícula não há campos, e mesmo assim o potencial vetor modifica a dinâmica do monopolo, o que justifica o fato de que \vec{A}_e seja uma grandeza mais fundamental de que o campo \vec{E} .

A função de onda, $\Psi(\vec{x}, t)$, solução da Eq. (5.48), como pontuado por Dirac [16] e mencionado

por Berry [2, 100] é construída da seguinte forma

$$\Psi(\vec{x}, t) = \Psi_0(\vec{x}, t) \exp \left[-i \frac{g}{\hbar c} \int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}} \vec{A}_e(\vec{x}') \cdot d\vec{x}' \right], \quad (5.49)$$

sendo \vec{x}_0 um ponto de referência escolhido de forma arbitrária. Apartir da solução (5.49) é possível resgatar a Eq. de Schrödinger desacoplada ao potencial \vec{A}_e . Isso pode ser feito ao considerarmos a definição⁵

$$\Omega(\vec{x}) \equiv -\frac{g}{\hbar c} \int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}} \vec{A}_e(\vec{x}') \cdot d\vec{x}', \quad (5.50)$$

com o propósito de tornar o cálculo um pouco menos carregado. Em termos de $\Psi_0(\vec{x}, t)$, o gradiente de $\Psi(\vec{x}, t)$ é

$$\nabla \Psi(\vec{x}, t) = e^{i\Omega(\vec{x})} (i\nabla\Omega(\vec{x})) \Psi_0(\vec{x}, t) + e^{i\Omega(\vec{x})} (\nabla\Psi_0(\vec{x}, t)). \quad (5.51)$$

Como $\nabla\Omega(\vec{x}) = -\frac{g}{c}\vec{A}_e$, avaliado diretamente da Eq. (5.50), de modo que

$$\left(-i\hbar\vec{\nabla} + \frac{g}{c}\vec{A}_e \right) \Psi(\vec{x}, t) = -i\hbar e^{i\Omega(\vec{x})} \nabla\Psi_0(\vec{x}, t), \quad (5.52)$$

segue-se que

$$\left(-i\hbar\vec{\nabla} + \frac{g}{c}\vec{A}_e \right)^2 \Psi(\vec{x}, t) = -\hbar^2 e^{i\Omega(\vec{x})} \nabla^2\Psi_0(\vec{x}, t). \quad (5.53)$$

Ao inserir esse resultado na Eq. (5.48) e com o cancelamento do fator comum $e^{i\Omega(\vec{x})}$, encontra-se a Eq. de Schrödinger desacoplada ou, na ausência do campo elétrico no solenóide (dado que na dependência de \vec{A}_e , ϕ_e é expresso em função de \vec{E}),

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_0(\vec{x}, t) + \mathbf{V}(\vec{x}, t)\Psi_0(\vec{x}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_0(\vec{x}, t). \quad (5.54)$$

Conclui-se então que, $\Psi_0(\vec{x}, t)$ satisfaz a equação de Schrödinger sem a presença do potencial vetor \vec{A}_e . Com a solução dessa equação, fazer a correção que justifique a presença do potencial vetor torna-se simples ao tomar o produto por $e^{i\Omega(\vec{x})}$. A solução geral da Eq. (5.48), na ausência do potencial $\mathbf{V}(\vec{x}, t)$ se dá como,

$$\Psi(\vec{x}, t) = \psi_0(\vec{x})e^{-itE_0/\hbar} \exp \left[-i \frac{g}{\hbar c} \int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}} \vec{A}_e \cdot d\vec{x} \right], \quad (5.55)$$

onde $\psi_0(\vec{x})$ é a solução da equação de Schrödinger independente do tempo e E_0 seu respectivo autovalor de energia na ausência do campo elétrico.

⁵A definição faz sentido somente quando $\vec{\nabla} \times \vec{A}_e = 0$ para toda região em questão, do contrário, a integral de linha dependeria do trajeto que conecta \vec{x}_0 à \vec{x} , e dessa forma, não definiria uma função de \vec{x} [24].

5.2.0.1 Modificação dos níveis de energia

A configuração física do sistema abordado, como indicado na figura (5.2), trata uma partícula com carga g , restrita a se mover em uma trajetória circular de raio b e concêntrica ao solenóide, disposto perpendicularmente ao plano dessa órbita e com raio $R < b$, onde em seu interior há fluxo de campo elétrico uniforme.

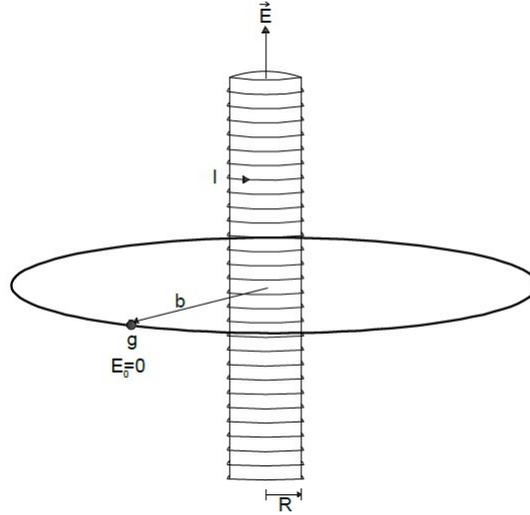


Figura 5.2. Monopólio magnético executando uma trajetória circular, perpendicular ao eixo do solenóide - adaptado da Ref. [24].

Por questões práticas, o solenóide é considerado muito longo (suposto infinito), assim não havendo fuga de campo no domínio da partícula. Apesar da inexistência de campo fora do solenóide, como mencionado na seção anterior, na região onde a partícula se encontra o potencial vetor é diferente de zero, e dado em função do fluxo no interior do solenóide como

$$\vec{\mathbf{A}}_e = \frac{\Phi_e}{2\pi r} \hat{e}_\varphi \quad (r > R), \quad (5.56)$$

sendo $\Phi_e = \pi R^2 E_0$, o fluxo elétrico através do solenóide.

Na ausência de densidade de cargas, isto é, com o solenóide descarregado, o potencial escalar é nulo. Dessa condição, resulta que o operador Hamiltoniano do sistema fica

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} + \frac{g}{c} \vec{\mathbf{A}}_e \right)^2 \\ &= \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \nabla^2 + \left(\frac{g}{c} \vec{\mathbf{A}}_e \right)^2 - \frac{2i\hbar g}{c} (\vec{\mathbf{A}}_e \cdot \vec{\nabla}) \right]. \end{aligned} \quad (5.57)$$

A julgar pela simetria do problema, o operador diferencial $\vec{\nabla}$ pode ser dado tanto em coordenadas esféricas, quanto em coordenadas cilíndricas, já que o movimento circular de raio constante b é realizado no plano perpendicular ao solenóide, isto é $\theta = \pi/2$, ficando então $\vec{\nabla} \rightarrow \left(\frac{1}{b} \frac{d}{d\varphi} \hat{e}_\varphi \right)$. A função de onda da partícula é na verdade uma função apenas da variável

azimutal (φ). A equação de Schrödinger independente do tempo, quando considerada a Eq. (5.56), fica

$$\frac{1}{2m} \left[-\frac{\hbar^2}{b^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} - \frac{i\hbar g\Phi_e}{c\pi b^2} \frac{d}{d\varphi} + \left(\frac{g\Phi_e}{2\pi b c} \right)^2 \right] \psi(\varphi) = E\psi(\varphi), \quad (5.58)$$

que se caracteriza por ser uma equação diferencial linear com coeficientes constantes:

$$\left(\frac{d^2}{d\varphi^2} + 2i\beta \frac{d}{d\varphi} + \xi \right) \psi(\varphi) = 0 \quad (5.59)$$

com as definições

$$\beta \equiv \frac{g\Phi_e}{2\pi\hbar c} \quad (5.60)$$

e

$$\xi \equiv \left(\frac{2mb^2E}{\hbar^2} - \beta^2 \right). \quad (5.61)$$

Da teoria de equações diferenciais elementares [140], as soluções da Eq. (5.59) são da forma $\psi(\varphi) = D e^{i\lambda\varphi}$, onde D é a constante de normalização. Ao substituí-la na Eq. (5.59), encontra-se a seguinte equação característica

$$\lambda^2 + 2\beta\lambda - \xi = 0, \quad (5.62)$$

da qual, se obtém as raízes

$$\begin{aligned} \lambda &= -\beta \pm \sqrt{\beta^2 + \xi} \\ &= -\beta \pm \frac{b}{\hbar} \sqrt{2mE}. \end{aligned} \quad (5.63)$$

Para que $\psi(\varphi)$ possa de fato representar a solução da Eq. (5.59), sua continuidade em $\varphi = 2\pi$, requer que λ seja um número inteiro, o que significa

$$n = -\beta \pm \frac{b}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad (5.64)$$

de onde conclui-se que,

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mb^2} \left(n + \frac{g\Phi_e}{2\pi\hbar c} \right)^2, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots). \quad (5.65)$$

Os autovalores de energia podem ser melhor avaliados quando considerada a convenção:

CONVENÇIONANDO A CARGA MAGNÉTICA

Tabela 5.2. Convenção adotada para distinguir a carga magnética.

Pólos	Carga do Pólo	Sinal da Carga
Norte	g_N	$g > 0$
Sul	g_S	$g < 0$

A Eq. (5.65) indica que o solenóide quebra a dupla degenerescência da energia do monopolo em seu movimento circular: n negativo representa a partícula movimentando-se na mesma direção e sentido da corrente no solenóide e corresponde a uma energia mais baixa (assumindo que $g = g_N$, como nas Ref. [6,7]), quando comparado com o caso em que o solenóide esta ausente; n positivo descreve uma partícula movendo-se em sentido oposto ao da corrente no solenóide. Este, é um exemplo simplificado do efeito Aharonov-Bohm dual em sua versão de estados ligados, onde as energias permitidas claramente dependem do campo \vec{E} no interior do solenóide, mesmo sendo este nulo no domínio da função de onda da partícula.

5.3 O experimento de interferência por fenda dupla

Básicamente, os efeitos Aharonov-Bohm (AB) e, por analogia o Aharonov-Bohm dual (ABd), caracterizam-se por gerarem interferências no padrão de difração entre feixes coerentes dotados de carga, de aspecto puramente quântico, consequência da presença do potencial vetor.

Supondo inicialmente, um feixe de partículas carregadas, projetadas por uma fonte, ao incidirem sobre um solenóide impenetrável, de comprimento muito longo (suposto infinito) e raio infinitesimal (blindando o campo em seu interior), subdivide-se num primeiro momento, recombina-se num instante posterior em uma região de interferência. A função de onda recombinada, associada ao estado final das partículas carregadas, acumula uma fase quântica extra, responsável por interferências observadas no padrão de distribuição da densidade de probabilidade. Por questões de discussões teóricas, será mais conveniente considerar feixes de partículas produzidos por um sistema de fenda dupla.

O tratamento matemático de maior sucesso em produzir resultados que concordam com dados experimentais é o método das Integrais de Trajetória de Feynman [90, 141]. Na Ref. [142] é apresentada uma interessante introdução pedagógica a este método quando empregado na obtenção da solução analítica do clássico problema de difração e interferência de elétrons por mecanismos de fenda simples e dupla.

Foram feitos diversos trabalhos ao longo dos anos onde o conceito de integrais de trajetória foram empregados no tratamento do efeito AB [99, 143–145]. Nesta seção, o método das integrais de caminho será empregado na avaliação das densidades de probabilidade quando analisado os padrões de difração gerados pelo mecanismo de fenda dupla.

5.3.0.2 Integrais de trajetórias não relativísticas

Em 1948, Richard Phillips Feynman [141] formulou o conceito de integral de trajetória, ao basear-se em um artigo de A. P. M. Dirac [146]. Sua proposta fundamentava-se no princípio de mínima ação quântica: "A amplitude de transição sobre os estados $|a\rangle$ e $|b\rangle$ de um sistema quântico-mecânico é a soma das contribuições elementares, uma para cada trajetória, passando em $|a\rangle$ no instante t_a , e em $|b\rangle$ no instante t_b . Cada uma dessas contribuições possui o mesmo módulo, porém, sua fase é a ação clássica S_{cl} para cada caminho" [90]. Esse princípio é traduzido por:

$$K(a \rightarrow b) = \int_a^b \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}\right) D[x(t)], \quad (5.66)$$

em que

$$S_{cl}(b, a) = \int_a^b L(q, \dot{q}, t) dt, \quad (5.67)$$

e $D[x(t)]$ é a *medida de Feynman*. A integral deve ser feita sobre todos os caminhos que conectam os pontos (a, t_a) e (b, t_b) . A integral que define $K(a \rightarrow b)$ é chamada de *integral de caminho* ou *propagador de Feynman* [90].

No artigo de A.P.M.Dirac, havia a afirmação de que a amplitude de transição entre dois estados quânticos de um sistema durante um intervalo de tempo ϵ era *análogo* a função $\exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{cl}\right)$ desse sistema. Em seu trabalho, Feynman mostrou que o *análogo* era *igual a*, usando o argumento da função exponencial como a integral da Lagrangiana, isto é, ao considerar a *ação* S [90].

5.3.0.3 Abordagem qualitativa via integrais de caminho

Considere um monopolo de carga g , quando tratado do ponto de vista quântico, que assume uma natureza dual, onda-partícula, e assim podendo difratar-se sobre as fendas, como ilustrado na figura (5.4) (seguindo acima e abaixo de um longo cilindro impenetrável). Como mencionado em seções anteriores, no interior do cilindro existe um campo elétrico \vec{E} , constante e paralelo ao eixo do solenóide, perpendicular ao plano da página, tal como esboçado na figura (5.3).

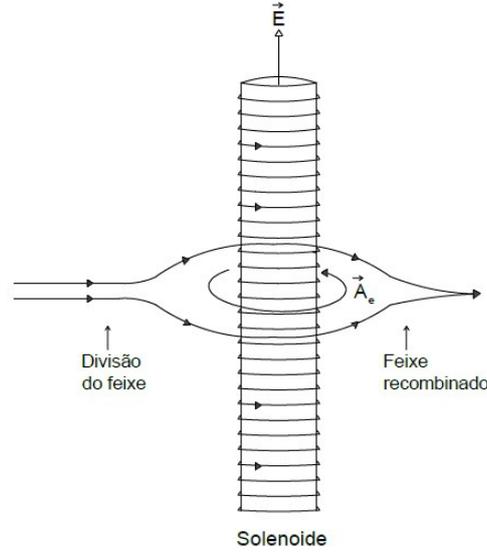


Figura 5.3. Efeito Aharonov-Bohm dual: o feixe de monopolos se divide e suas metades passam por ambos os lados de um solenoide suposto infinito - adaptado da Ref. [24].

Na seção (5.2), encontramos a Lagrangiana clássica que representa um monopolo na presença de campos eletromagnéticos. Estando na ausência de cargas, isto é, com o próprio solenoide descarregado, o potencial escalar ϕ_m é nulo, e a Lagrangiana (5.35) pode ser dada em função da Lagrangiana na ausência do campo elétrico, nomeada por $L^{(0)}$, tal como

$$L^{(0)} = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 \longrightarrow L^{(0)} - \frac{g}{c}\dot{\mathbf{x}} \cdot \vec{\mathbf{A}}_e. \quad (5.68)$$

A correspondente mudança na ação, para qualquer segmento definido do caminho que conecta os pontos de coordenadas espaço-temporal $(\vec{\mathbf{x}}_{n-1}, t_{n-1})$ a $(\vec{\mathbf{x}}_n, t_n)$ é dada por

$$S^{(0)}(n, n-1) \longrightarrow S^{(0)}(n, n-1) - \frac{g}{c} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \vec{\mathbf{A}}_e \cdot \dot{\mathbf{x}} dt. \quad (5.69)$$

Porém, esta última integral pode ser reparametrizada, sendo escrita como

$$-\frac{g}{c} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \vec{\mathbf{A}}_e \cdot \left(\frac{d\vec{\mathbf{x}}}{dt} \right) dt = -\frac{g}{c} \int_{\vec{\mathbf{x}}_I}^{\vec{\mathbf{x}}_F} \vec{\mathbf{A}}_e \cdot d\vec{\mathbf{x}}, \quad (5.70)$$

onde $d\vec{\mathbf{x}}$ é o elemento diferencial de linha ao longo do segmento da trajetória, de tal modo que, quando considerada a contribuição total de $\vec{\mathbf{x}}_I$ (onde se localiza a fonte emissora) a $\vec{\mathbf{x}}_F$ (região de interferência), tem-se a seguinte mudança:

$$\prod \exp \left[\frac{iS^{(0)}(n, n-1)}{\hbar} \right] \longrightarrow \left\{ \prod \exp \left[\frac{iS^{(0)}(n, n-1)}{\hbar} \right] \right\} \exp \left(-\frac{ig}{\hbar c} \int_{\vec{\mathbf{x}}_I}^{\vec{\mathbf{x}}_F} \vec{\mathbf{A}}_e \cdot d\vec{\mathbf{x}} \right). \quad (5.71)$$

Tudo isto é válido para um caminho em particular, passando acima ou abaixo do solenoide. Portanto, ao considerar a contribuição de todos os caminhos possíveis (acima ou abaixo do

solenóide) temos a amplitude de transição da partícula ao deixar a fonte no ponto \vec{x}_I e atingir a tela de interferência no ponto \vec{x}_F , representada por uma integral de caminho ou propagador de Feynman

$$K(I \rightarrow F) = \int \exp \left[\frac{iS^{(0)}(\vec{x}_I, \vec{x}_F)}{\hbar} \right] \left\{ \exp \left(-\frac{ig}{\hbar c} \int_{\vec{x}_I}^{\vec{x}_F} \vec{A}_e \cdot d\vec{x} \right) \right\} D[\mathbf{x}(t)]. \quad (5.72)$$

A amplitude de transição ou propagador total é dado pela soma dos propagadores $K_{acima}(I \rightarrow F)$ e $K_{abaixo}(I \rightarrow F)$, associados respectivamente as contribuições das trajetórias que passam por cima e por baixo do solenóide, como na figura (5.4),

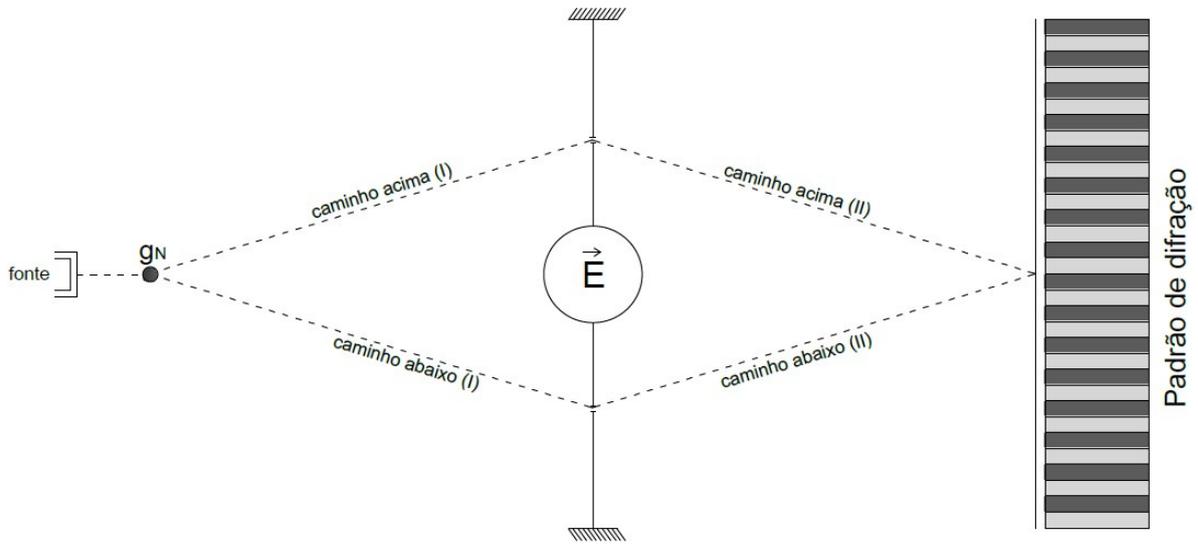


Figura 5.4. A natureza quântica dual, onda-partícula, do monopolo garante sua difração por entre as fendas, como também permite sua recominação na geração das franjas de interferência típicas desse fenômeno.

e assume a forma:

$$K(I \rightarrow F) = \int_{acima} \exp \left[\frac{iS^{(0)}(\vec{x}_I, \vec{x}_F)}{\hbar} \right] \left\{ \exp \left(-\frac{ig}{\hbar c} \int_{\vec{x}_I}^{\vec{x}_F} \vec{A}_e \cdot d\vec{x} \right)_{acima} \right\} D[\mathbf{x}(t)] \\ + \int_{abaixo} \exp \left[\frac{iS^{(0)}(\vec{x}_I, \vec{x}_F)}{\hbar} \right] \left\{ \exp \left(-\frac{ig}{\hbar c} \int_{\vec{x}_I}^{\vec{x}_F} \vec{A}_e \cdot d\vec{x} \right)_{abaixo} \right\} D[\mathbf{x}(t)]. \quad (5.73)$$

Trajetórias que, ao circularem o solenóide, se distanciarem muito das trajetórias clássicas, serão ignoradas - uma vez que pouco contribuem para a amplitude total [90]. Em cada parcela que compõe o propagador total, há um fator de fase do tipo $\left(-\frac{g}{c} \int_{\vec{x}_I}^{\vec{x}_F} \vec{A}_e \cdot d\vec{x} \right)$ que expressa a dependência com o fluxo de campo elétrico Φ_e no interior do solenóide. Na região em que o monopolo se encontra, o campo $\vec{E} = \vec{\nabla} \times \vec{A}_e$ é nulo, e as integrais de linha de \vec{A}_e , acima e abaixo do solenóide, dependem apenas dos pontos terminais \vec{x}_I e \vec{x}_F e não de trajetórias específicas quando formado um laço por caminhos diferentes. Assim, as exponenciais que

contém $\vec{\mathbf{A}}_e$ são independentes das trajetórias sob as quais se está integrando. E com isso, o propagador total fica

$$K(I \rightarrow F) = \left\{ \exp \left(-\frac{ig}{\hbar c} \int_{\vec{x}_I}^{\vec{x}_F} \vec{\mathbf{A}}_e \cdot d\vec{x} \right)_{acima} \right\} \int_{acima} \exp \left[\frac{iS^{(0)}(\vec{x}_I, \vec{x}_F)}{\hbar} \right]_{acima} D[\mathbf{x}(t)] \\ + \left\{ \exp \left(-\frac{ig}{\hbar c} \int_{\vec{x}_I}^{\vec{x}_F} \vec{\mathbf{A}}_e \cdot d\vec{x} \right)_{abaixo} \right\} \int_{abaixo} \exp \left[\frac{iS^{(0)}(\vec{x}_I, \vec{x}_F)}{\hbar} \right]_{abaixo} D[\mathbf{x}(t)] \quad (5.74)$$

A probabilidade de se encontrar o monopolo num dado ponto \vec{x}_F , tendo inicialmente partido do ponto \vec{x}_I , é dado pelo quadrado do módulo da amplitude de transição total⁶

$$P(I \rightarrow F) = |K(I \rightarrow F)|^2 \\ = \left| \left\{ \exp \left(-\frac{ig}{\hbar c} \int_{\vec{x}_I}^{\vec{x}_F} \vec{\mathbf{A}}_e \cdot d\vec{x} \right)_{acima} \right\} \int_{acima} \exp \left[\frac{iS^{(0)}(\vec{x}_I, \vec{x}_F)}{\hbar} \right]_{acima} D[\mathbf{x}(t)] \right|^2 + \\ + \left| \left\{ \exp \left(-\frac{ig}{\hbar c} \int_{\vec{x}_I}^{\vec{x}_F} \vec{\mathbf{A}}_e \cdot d\vec{x} \right)_{abaixo} \right\} \int_{abaixo} \exp \left[\frac{iS^{(0)}(\vec{x}_I, \vec{x}_F)}{\hbar} \right]_{abaixo} D[\mathbf{x}(t)] \right|^2 + \\ + 2\Re \left[\exp \left(-\frac{ig}{\hbar c} \int_{\vec{x}_I}^{\vec{x}_F} \vec{\mathbf{A}}_e \cdot d\vec{x} \Big|_{acima} \right) \exp \left(\frac{ig}{\hbar c} \int_{\vec{x}_I}^{\vec{x}_F} \vec{\mathbf{A}}_e \cdot d\vec{x} \Big|_{abaixo} \right) \times \right. \\ \times \left(\int_{acima} \exp \left[\frac{iS^{(0)}(\vec{x}_I, \vec{x}_F)}{\hbar} \right]_{acima} D[\mathbf{x}(t)] \right) \times \\ \left. \times \left(\int_{abaixo} \exp \left[\frac{iS^{(0)}(\vec{x}_I, \vec{x}_F)}{\hbar} \right]_{abaixo} D[\mathbf{x}(t)] \right)^* \right]. \quad (5.75)$$

As exponenciais na segunda e terceira linha, fora das integrais, na equação anterior serão descartadas, pois seu módulo ao quadrado é numericamente igual a um. A combinação das exponenciais na quarta linha geram uma integral de linha fechada do potencial vetor em torno do solenóide, a qual pode ser identificada como a diferença de fase entre as contribuições dos caminhos acima e abaixo do solenóide. A diferença de fase devido ao campo $\vec{\mathbf{E}}$, presente na região $r < R$, é simplesmente

$$\left[-\frac{g}{\hbar c} \int_{\vec{x}_I}^{\vec{x}_F} \vec{\mathbf{A}}_e \cdot d\vec{x} \right]_{acima} + \left[\frac{g}{\hbar c} \int_{\vec{x}_I}^{\vec{x}_F} \vec{\mathbf{A}}_e \cdot d\vec{x} \right]_{abaixo} = \left(-\frac{g}{\hbar c} \right) \oint_{\vec{x}_I}^{\vec{x}_F} \vec{\mathbf{A}}_e \cdot d\vec{x} \\ = \left(-\frac{g\pi R^2 E_0}{\hbar c} \right) \\ = \left(-\frac{g}{\hbar c} \Phi_e \right). \quad (5.76)$$

O circuito fechado, no cálculo da integral de linha, é feito no sentido ant-horário em torno do solenóide, e Φ_e é o fluxo através dele. A expressão (5.75) poderá ser melhor avaliada ao

⁶ $|z_1 + z_2|^2 = (z_1 + z_2)(z_1^* + z_2^*) = |z_1|^2 + |z_2|^2 + 2\Re(z_1 z_2^*)$ [147].

considerar o resultado (5.76), assim como as seguintes definições:

$$K^{(0)}(I \rightarrow F)|_{acima} \equiv \int_{acima} \exp \left[\frac{iS^{(0)}(\vec{x}_I, \vec{x}_F)}{\hbar} \right]_{acima} D[\mathbf{x}(t)] \quad (5.77)$$

$$K^{(0)}(I \rightarrow F)|_{abaixo} \equiv \int_{abaixo} \exp \left[\frac{iS^{(0)}(\vec{x}_I, \vec{x}_F)}{\hbar} \right]_{abaixo} D[\mathbf{x}(t)] , \quad (5.78)$$

os quais são os propagadores associados a partícula livre. Ficando então, a probabilidade igual a

$$P(I \rightarrow F) = |K^{(0)}(I \rightarrow F)|_{acima}|^2 + |K^{(0)}(I \rightarrow F)|_{abaixo}|^2 + 2\Re \left[\exp \left(-\frac{i g \Phi_e}{\hbar c} \right) (K^{(0)}(I \rightarrow F)|_{acima}) (K^{(0)}(I \rightarrow F)|_{abaixo})^* \right] \quad (5.79)$$

As duas primeiras parcelas da Eq. (5.79) são probabilidades associadas a propagação livre do monopolo, tanto acima quanto abaixo do solenóide, e isoladas não manifestam nenhuma mudança no padrão de difração. Porém, a última parcela dessa equação exibe um termo, cuja dependência com o campo elétrico se faz através do fluxo Φ_e , associado diretamente a diferença de fase entre os caminhos, acima e abaixo do solenóide, responsável por gerar desvios no padrão de difração quando analisadas as distribuições de propabilidades.

Na Ref. [145] os autores investigam o efeito AB aplicando o método das integrais de caminho a um sistema de fenda dupla realístico na presença de um "whisker"⁷ no espaço entre as fendas. Com a ajuda do software Fortran eles foram capazes de trabalhar com os parâmetros físicos do problema (comprimento das fendas e a distância entre elas), empregado-os na expressão final da probabilidade, gerando as curvas que representavam as distribuições de probabilidade deslocadas, superpostas as curvas simétricas (na ausência de campo) para efeito de comparação. Considerações relacionadas ao efeito AB e deslocamentos no padrão de difração, também podem ser encontrados na Ref. [148].

É necessário enfatizar portanto, que os efeitos observáveis de interferência são puramente quânticos - uma vez que o campo elétrico influencia a dinâmica do monopolo, embora este campo seja nulo na região onde as funções de onda da partícula magnética esta definida. A probabilidade (5.79) de se observar o monopolo no ponto \vec{x}_F localizado na região de interferência exibirá uma componente senoidal que poderá ser controlada pela variação do campo elétrico no interior do solenóide. Classicamente, a dinâmica da partícula carregada não seria afetada, uma vez que a força de Lorentz dual é nula na região em questão e dessa forma, o padrão de difração seria dado em função da soma das probabilidades de propagação livre.

⁷Em inglês significa cerda ou fio de bigode; no presente contexto toma-se por um filamento delgado de ferro magnetizado.

5.3.0.4 Analogia ao experimento de fenda dupla de Young

Uma característica peculiar do movimento ondulatório é o fenômeno de interferência. Isso ocorre quando dois ou mais movimentos ondulatórios coincidem no espaço e no tempo. Em 1801, Thomas Young realizou um experimento fundamental, empregando mecanismos de fenda dupla, para demonstrar a natureza ondulatória da luz. A primeira observação experimental na análise de difração e interferência de partículas massivas foi realizada por Jönson [149] em 1961. Além disso, existem também experimentos que tratam da difração de nêutrons por fendas simples e duplas [150] e em óptica quântica acerca de interferência óptica [151].

No presente contexto, uma vez considerada a natureza quântica dual onda-partícula do monopolo, empregaremos o método análogo ao de T. Young ao aplicarmos o princípio da superposição linear, a fim de encontrar o deslocamento das franjas de interferência, típicas do padrão de difração, dado em função do fluxo de campo elétrico no interior do solenóide.

Ao reproduzirmos um experimento típico de fenda dupla, como representado na figura (5.5), um feixe de monopolos magnéticos g_N , de comprimento de onda λ e com o correspondente vetor de onda $k = 2\pi/\lambda$, incide perpendicularmente em um anteparo de fenda dupla, separadas por uma distância d ⁸.

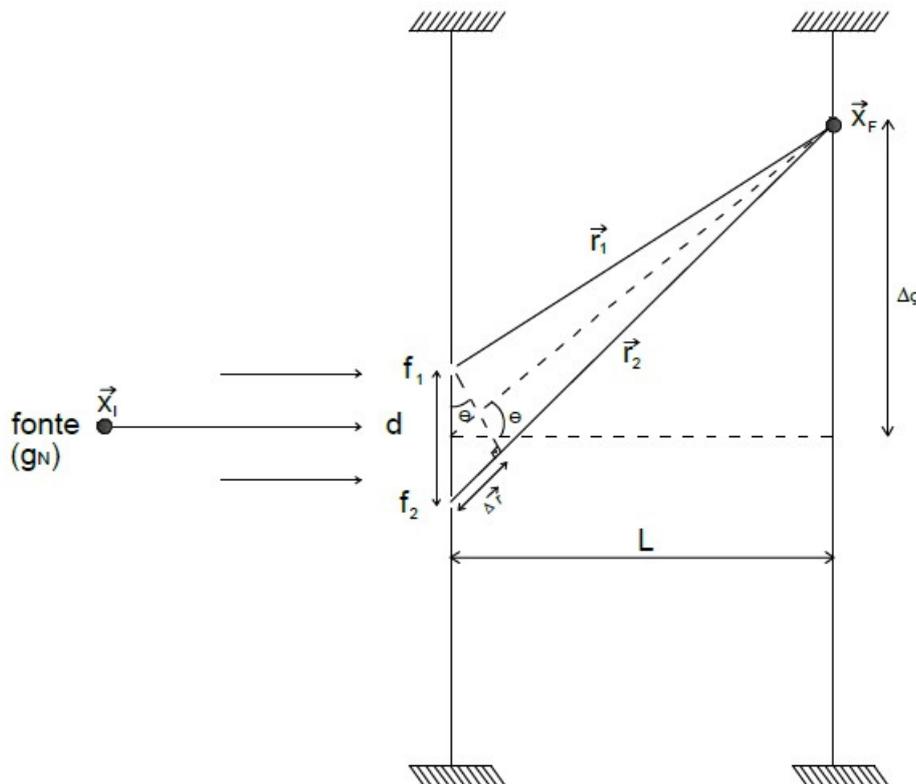


Figura 5.5. Arranjo experimental do mecanismo de fenda dupla.

Do Princípio de Huygens, as fendas f_1 e f_2 comportam-se como duas fontes (secundárias)

⁸Omitimos o solenóide para não sobrecarregar a figura.

pontuais (ver figura(5.5)), emissoras de ondas esféricas coerentes, oscilando em fase com a mesma frequência angular ω e amplitudes ξ_{01} e ξ_{02} . Suas respectivas ondas esféricas são:

$$\xi_1 = \xi_{01} \sin(\omega t - kr_1) \quad (5.80)$$

e

$$\xi_2 = \xi_{02} \sin(\omega t - kr_2), \quad (5.81)$$

em que r_1 e r_2 são as distâncias que separam as fendas f_1 e f_2 e o ponto X_F onde ocorre a interferência.

Posiciona-se um anteparo (sem furos) a uma distância L do plano das fendas. Mesmo sendo essas fontes síncronas, as amplitudes das ondas, gerada por cada uma delas, ao atingirem o ponto X_F no anteparo, não serão iguais. Isso se deve ao fato das distâncias r_1 e r_2 serem distintas e de que a amplitude de uma onda esférica decrescer com $1/r$.

Empregando a técnica dos vetores girantes, abordada na Ref. [152], os dois movimentos podem ser representados pela figura (5.6) abaixo:

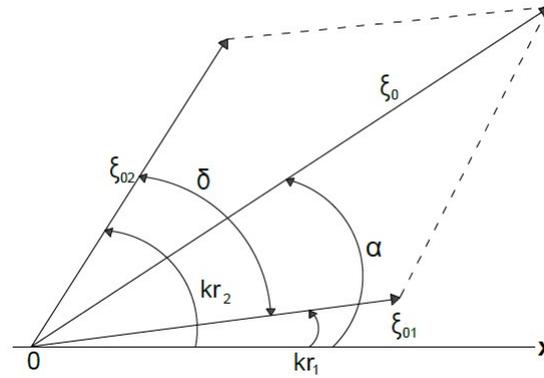


Figura 5.6. Adição vetorial (vetores girantes) - adaptado da Ref. [152]

Os vetores girantes ξ_{01} e ξ_{02} , fazem com o eixo x os ângulos $\alpha_1 = kr_1$ e $\alpha_2 = kr_2$, respectivamente. Como visto na figura (5.6) a amplitude ξ_0 , resultante vetorial, é dada em função da diferença de fase δ . A amplitude da perturbação resultante em X_F é

$$\xi_0 = \sqrt{\xi_{01}^2 + \xi_{02}^2 + 2\xi_{01}\xi_{02} \cos(\delta)}. \quad (5.82)$$

Da Eq. (5.82), nota-se que $\cos(\delta)$ pode ser $+1$ ou -1 . O que nos permite inferir que

$$\delta = \begin{cases} 2\pi n & , \text{interferência construtiva,} \\ (2n + 1)\pi & , \text{interferência destrutiva.} \end{cases} \quad (5.83)$$

Ao analisarmos a figura (5.6) notamos que a diferença de fase pode ser escrita como

$$\delta = kr_1 - kr_2 \quad (5.84)$$

$$= \frac{2\pi}{\lambda}(r_1 - r_2). \quad (5.85)$$

Dessa forma, a Eq. (5.83) pode agora ser avaliada em função da diferença entre as distâncias que conectam as fontes ao anteparo.

$$r_1 - r_2 = \begin{cases} n\lambda & , \text{interferência construtiva} \\ (2n + 1) \frac{\lambda}{2} & , \text{interferência destrutiva.} \end{cases} \quad (5.86)$$

Na Ref. [152] os autores ainda argumentam que sendo este um problema espacial, $r_1 - r_2 =$ constante definem superfícies hiperbólicas de revolução (vistas na figura (5.7)).

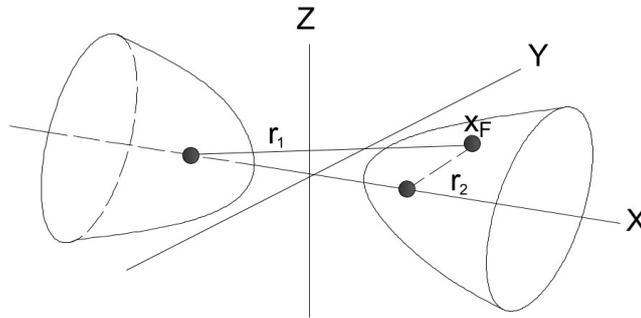


Figura 5.7. Superfícies hiperbólicas de revolução - adaptado da Ref. [152].

Isto é, nas superfícies hiperbólicas cujas equações são $r_1 - r_2 = \pm\lambda, \pm 2\lambda, \pm 3\lambda, \dots$, os dois movimentos ondulatórios interferem construtivamente. E as superfícies que a geram são chamadas de superfícies ventrais ou antinodais. Para superfícies hiperbólicas cujas equações são $r_1 - r_2 = \pm\frac{1}{2}\lambda, \pm\frac{3}{2}\lambda, \dots$, os dois movimentos ondulatórios interferem destrutivamente. Estas são as superfícies nodais. O padrão geral é então uma sucessão de superfícies alternadas, ventrais e nodais.

Em cada ponto do espaço, o movimento ondulatório resultante tem uma amplitude característica dada em função da Eq. (5.82), tal que

$$\xi = \xi_0 \sin(\omega t - \alpha). \quad (5.87)$$

Uma série de franjas, alternadamente claras e escuras, como visto na figura (5.4), surge no anteparo, em virtude da interseção do anteparo com as superfícies hiperbólicas ventrais e nodais.

Se a separação d entre as fendas f_1 e f_2 é pequena quando comparado com a distância L e sendo também $L \gg \Delta\zeta$, ao inspecionarmos a figura (5.5), sendo θ é um ângulo pequeno, obtemos

$$\sin(\theta) \approx \tan(\theta) = \frac{\Delta\zeta}{L}, \quad (5.88)$$

como também $\sin(\theta) = \frac{|\Delta\vec{r}|}{d}$, que juntamente com a Eq. (5.84), fornece

$$\Delta\zeta = \frac{L\delta}{kd}. \quad (5.89)$$

Da Eq. (5.79), podemos identificar a diferença de fase δ como sendo

$$\delta = -\frac{g\Phi_e}{\hbar c}, \quad (5.90)$$

e concluir dessa forma, que o deslocamento das franjas de interferência é dado por

$$\Delta\zeta = -\frac{gL\Phi_e}{\hbar ckd}, \quad (5.91)$$

em que $k = \frac{\sqrt{2mE_0}}{\hbar}$ é o número de onda no monopolo. É importante lembrar que este tratamento é válido somente no regime não-relativístico.

5.4 A fase quântica de Berry

Na Ref. [2], M. V. Berry demonstra que o efeito Aharonov-Bohm pode ser interpretado como um exemplo de fase geométrica. Seguindo os mesmos passos, dados por ele nesta referência, vamos agora considerar o cálculo da fase de Berry associada a dinâmica do monopolo magnético na presença do solenóide como indicado na figura (5.8).

Para isso, vamos considerar o monopolo de carga g confinado no interior de uma caixa cúbica por um potencial $V(\vec{x} - \vec{R})$ como ilustrado na figura (5.8). Sendo \vec{R} o vetor cuja origem esta sobre o eixo do solenóide (direção do fluxo)- origem do sistema coordenado, e extremidade centrada na caixa cúbica. O vetor \vec{x} representa o posição do monopólo no interior da caixa cúbica em relação a origem do sistema.

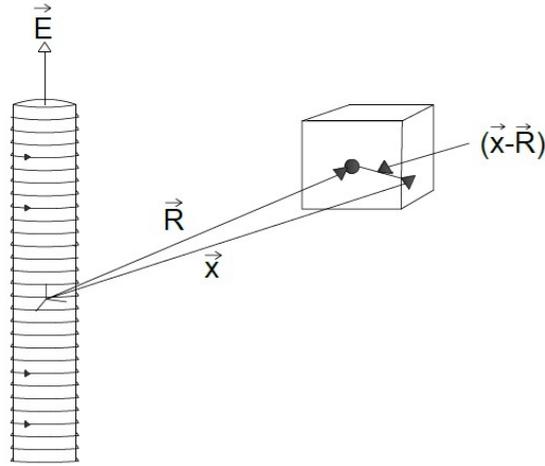


Figura 5.8. Monopolo magnético confinado numa caixa cúbica sendo transportado ao longo de uma curva C em torno do solenóide - adaptado da Ref. [24].

As autofunções do operador Hamiltoniano podem ser encontradas por

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\vec{\nabla} + \frac{g}{c}\mathbf{A}_e \right)^2 + V(\vec{x} - \vec{R}) \right] \psi_n = E_n \psi_n. \quad (5.92)$$

Como discutido na seção (5.2), as soluções de Eq. (5.92) são encontradas ao usarmos o fator de fase de Dirac

$$\psi_n = e^{i\Omega} \psi'_n, \quad (5.93)$$

com ψ'_n , uma função do deslocamento $(\vec{x} - \vec{R})$, satisfazendo a mesma equação de autovalor, porém com $\vec{A}_e \rightarrow 0$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x} - \vec{R}) \right) \psi'_n = E_n \psi'_n, \quad (5.94)$$

em que, por definição

$$\Omega \equiv -\frac{g}{\hbar c} \int_{\vec{R}}^{\vec{x}} \vec{A}_e(\vec{x}') \cdot d\vec{x}'. \quad (5.95)$$

Nesse ponto, o autor da Ref. [24] ressalta a importância de se estabelecer um ponto de referência \mathcal{O} no centro da caixa. Uma vez que isso assegura a recuperação da fase, inicialmente convencional, ao fim de um trajeto em torno do solenóide.

Na Ref. [2], Berry representa esse cenário (ao tratar o efeito Aharonov-Bohm) com a figura (5.9),

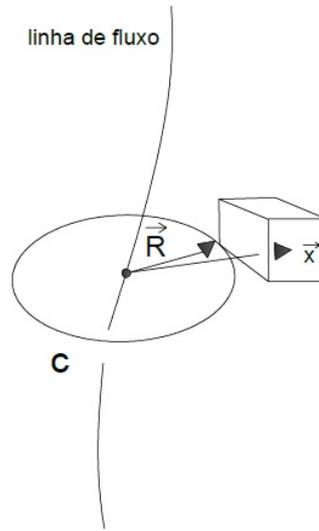


Figura 5.9. O efeito Aharonov-Bohm dual como manifestação da fase de Berry. Monopolo magnético no interior de uma caixa cúbica sendo transportado ao longo de uma curva C em torno de uma linha de fluxo - adaptado da Ref. [2].

onde consideramos o solenóide da figura (5.8) extremamente delgado e admitindo-o como uma simples linha de fluxo. A caixa cúbica é então transportada em torno da linha de fluxo sobre a curva C (ou em torno do solenóide (5.8)) e neste caso em particular, Berry ainda argumenta que o processo não precisa ser necessariamente adiabático. Apesar da figura (5.9) indicar que a extremidade do vetor \vec{R} encontra-se sobre um dos vértices do cubo, o autor da Ref. [25], ao tratar sobre o assunto (neste caso o efeito AB), deixa claro que o ponto de referência que denota a extremidade do vetor \vec{R} deve estar dentro da caixa cúbica. Para calcular a fase de Berry, devemos determinar a priori a quantidade $\langle \psi_n; \vec{R} | (\nabla_{\vec{R}} | \psi_n; \vec{R} \rangle)$. Observando que [24]

$$\begin{aligned} \nabla_{\vec{R}} \psi_n &= \nabla_{\vec{R}} \left[e^{i\Omega} \psi'_n(\vec{x} - \vec{R}) \right] \\ &= \left(i \frac{g}{c\hbar} \vec{A}_e(\vec{R}) \psi'_n(\vec{x} - \vec{R}) + \nabla_{\vec{R}} \psi'_n(\vec{x} - \vec{R}) \right) e^{i\Omega}, \end{aligned} \quad (5.96)$$

encontramos que,

$$\begin{aligned} \langle \psi_n; \vec{R} | (\nabla_{\vec{R}} | \psi_n; \vec{R} \rangle) &= \int e^{-i\Omega} \left[\psi'_n(\vec{x} - \vec{R}) \right]^* e^{i\Omega} \left[i \frac{g}{c\hbar} \vec{A}_e(\vec{R}) \psi'_n(\vec{x} - \vec{R}) + \right. \\ &\quad \left. + (\nabla_{\vec{R}} \psi'_n(\vec{x} - \vec{R})) \right] d^3\vec{x} \\ &= i \frac{g}{c\hbar} \vec{A}_e(\vec{R}) - \int \left\{ \left[\psi'_n(\vec{x} - \vec{R}) \right]^* (\nabla_{\vec{x}} \psi'_n(\vec{x} - \vec{R})) \right\} d^3\vec{x}. \end{aligned} \quad (5.97)$$

O gradiente $\nabla_{\vec{x}}$, quando age sobre uma função de $(\vec{x} - \vec{R})$, exibe a propriedade $\nabla_{\vec{R}} = -\nabla_{\vec{x}}$. A integral da Eq. (5.97) é basicamente i/\hbar vezes o valor esperado do momento em um autoestado do Hamiltoniano $(-\hbar^2/2m)\nabla^2 + V$ e de acordo com a Ref. [24], é identicamente

nulo. Portanto,

$$\langle \psi_n; \vec{\mathbf{R}} | (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \psi_n; \vec{\mathbf{R}}) \rangle = i \frac{g}{c\hbar} \vec{\mathbf{A}}_e(\vec{\mathbf{R}}). \quad (5.98)$$

Empregando este resultado na forma da fase de Berry (ver Eq. (2.39)), encontramos

$$\begin{aligned} \gamma_n(C) &= i \oint_C \langle \psi_n; \vec{\mathbf{R}} | (\nabla_{\vec{\mathbf{R}}} | \psi_n; \vec{\mathbf{R}}) \rangle \cdot d\vec{\mathbf{R}} \\ &= -\frac{g}{c\hbar} \oint_C \vec{\mathbf{A}}_e(\vec{\mathbf{R}}) \cdot d\vec{\mathbf{R}} \\ &= -\frac{g\Phi_e}{c\hbar}, \end{aligned} \quad (5.99)$$

confirmando assim o resultado da Ref. [6], e revelando que o efeito Aharonov-Bohm dual é um caso particular de fase geométrica.

Quando o espaço de parâmetros é tridimensional, $\vec{\mathbf{R}} = (R_1, R_2, R_3)$, a Eq. (2.39) (fase de Berry) nos remete a expressão para o fluxo elétrico em termos do potencial vetor $\vec{\mathbf{A}}_e$.

O fluxo, Φ_{flux} , através de uma superfície S delimitada por uma curva C , como visto na figura (5.10), é

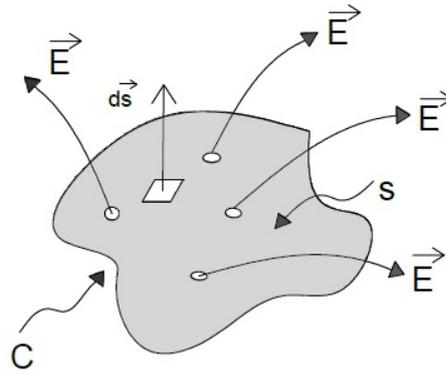


Figura 5.10. Fluxo de campo elétrico através da superfície S definida pela curva fechada C - adaptado da Ref. [24].

$$\Phi_{flux} = \iint_S \vec{\mathbf{E}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_n ds, \quad (5.100)$$

e sendo o campo elétrico dado em função do potencial vetor (ver Eq. (5.16)), com a ajuda do Teorema de Stokes, obtemos a seguinte expressão

$$\Phi_{flux} = \iint_S (\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{A}}_e) \cdot \hat{\mathbf{e}}_n ds \quad (5.101)$$

$$= \oint_C \vec{\mathbf{A}}_e \cdot d\vec{\mathbf{x}}. \quad (5.102)$$

Assim, a fase de Berry pode ser entendida como o 'fluxo' de um 'campo elétrico'

$$\begin{aligned}
 \vec{E}' &= i\vec{\nabla}_{\vec{R}} \times \langle \psi_n; \vec{R} | (\nabla_{\vec{R}} | \psi_n; \vec{R} \rangle) \\
 &= -\frac{g}{c\hbar} (\vec{\nabla} \times \vec{A}_e) \\
 &= -\frac{g}{c\hbar} \vec{E},
 \end{aligned} \tag{5.103}$$

por meio da trajetória de circuito fechado (C) no espaço de parâmetros,

$$\begin{aligned}
 \gamma_n(C) &= \iint_S \vec{E}' \cdot \hat{e}_n ds \\
 &= -\frac{g}{c\hbar} \iint_S \vec{E} \cdot \hat{e}_n ds.
 \end{aligned} \tag{5.104}$$

E nesse caso, podemos observar por meio das Eqs. (5.100) e (5.104), que a equivalência entre a fase de Berry e o fluxo de campo elétrico é quase uma identidade [24].

Capítulo 6

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho teve por objetivo fazer uma revisão literária no que compete a teoria sobre fases geométricas, em particular a fase de Berry. Para tal, a pesquisa apoiou-se num conjunto de referências que remontam as investigações atribuídas aos primeiros passos dados na direção da sua descoberta e a generalização de sua importância aos mais variados campos da física.

Assumimos a postura original de M.V. Berry [2], em princípio, na abordagem do conceito de fase geométrica. Através da representação de Schrödinger, estudamos um sistema quântico não-degenerado governado por um operador Hamiltoniano parametricamente dependente do tempo. Mostramos consistentemente, como nas Refs. [15, 24–26, 55] o surgimento da fase de Berry dadas as condições de evolução temporal cíclica e adiabática. Em virtude disso, no Cap.(3) empregamos uma demonstração alternativa do teorema adiabático [59], originalmente apresentada na Ref. [4], legitimando a aproximação adiabática considerada no Cap.(2).

Investigamos também o comportamento da fase geométrica mediante mudança de base. E ao estudarmos o sistema de espectro não-degenerado, constatamos o surgimento de uma estrutura de calibre Abeliana clássica. Verificamos então que, para uma evolução cíclica no espaço de parâmetros, a fase de Berry se manifestará em medidas feitas do sistema, não podendo ser removida por mudança de base. Estendemos esse resultado ao caso em que o sistema se apresenta com espectro de energia degenerado, empregando a abordagem das Integrais de Trajetória [4, 5], o que nos valeu o surgimento de uma estrutura de calibre não-Abeliana clássica [4, 9].

Sendo a fase de Berry uma quantidade física, isto é, mensurável, demonstramos por meio da equivalência entre as representações de Schrödinger e Heisenberg a manifestação da fase geométrica contida na evolução de operadores Hermitianos associados a um certo observável.

Berry [2] ainda demonstra que o efeito Aharonov-Bohm pode ser interpretado como um exemplo de fase geométrica. Atribuímos essa ideia então ao estudo do efeito Aharonov-Bohm dual. Empregamos as transformações de dualidade das equações de Maxwell no

estudo da dinâmica do monopolo magnético sob influência no potencial vetor elétrico. Observou-se que mesmo não havendo campos (elétricos) no domínio da função de onda da partícula, o potencial vetor modificava a dinâmica do monopolo, acrescentando um fator de fase - fator de fase de Dirac- a sua função de onda.

No Cap.(2) muito se falou a respeito da linearidade da Eq. de Schrödinger e de suas soluções como superposições de autoestados instantâneos de energia. Como forma de checar a linearidade desses sistemas quânticos, efeitos de interferência podem ser experimentalmente medidos e assim, denunciando a influência das fases geométricas. Ao avaliarmos a dinâmica do monopolo magnético na presença de um solenóide elétrico, na concepção do efeito ABd, obtivemos a expressão da distribuição de probabilidades sobre a tela de interferência, e claramente surge um termo de interferência com dependência em relação ao fluxo de campo elétrico no interior do solenóide.

A título de comparação, construímos a tabela (6.1) resumindo as relações entre os parâmetros, distância entre franjas de interferência e a fase de Berry, associados aos efeitos AB e ABd.

Tabela 6.1. Comparação entre os feitos Aharonov-Bohm e Aharonov-Bohm dual.

Parâmetros	Aharonov-Bohm (AB)	Aharonov-Bohm dual (ABd)
$\Delta\zeta$	$\frac{qL\Phi_m}{ckd\hbar}$	$\frac{-gL\Phi_e}{ckd\hbar}$
$\gamma_n(C)$	$\frac{q\Phi_m}{c\hbar}$	$-\frac{g\Phi_e}{c\hbar}$

Como uma de nossas metas, reproduzimos de forma clara e concisa as ideias originais de M.V.Berry, empregando o teorema adiabático como mecanismo essencial para a formulação da fase de Berry (em sistemas quânticos degenerados e não-degenerados). Porém, dada a importância do assunto há muito o que se estudar, e como sugestões para pesquisas futuras, está a investigação da fase de Berry em sistemas de muitos corpos interagentes.

Referências Bibliográficas

- [1] Aharonov, Y. & Bohm, D. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *Physical Review* **115**, 485 (1959).
- [2] Berry, M. V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **392**, 45–57 (1984).
- [3] Jin-wei, W. & Guang-can, G. Geometric phases and schrödinger's cat state. *Acta Physica Sinica (Overseas Edition)* **4**, 406 (1995).
- [4] Alves, M. & Thomaz, M. Berry's phase through the path integral formulation. *American Journal of Physics* **75**, 552–560 (2007).
- [5] Berry, M. Quantum adiabatic anholonomy (1989).
- [6] Furtado, C. & Duarte, G. Dual aharonov–bohm effect. *Physica Scripta* **71**, 7 (2005).
- [7] Dowling, J. P., Williams, C. P. & Franson, J. D. Maxwell duality, lorentz invariance, and topological phase. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2486–2489 (1999).
- [8] Simon, B. Holonomy, the quantum adiabatic theorem, and berry's phase. *Phys. Rev. Lett.* **51**, 2167–2170 (1983).
- [9] Wilczek, F. & Zee, A. Appearance of gauge structure in simple dynamical systems. *Physical Review Letters* **52**, 2111 (1984).
- [10] Zee, A. Non-abelian gauge structure in nuclear quadrupole resonance. *Physical Review A* **38**, 1 (1988).
- [11] Aharonov, Y. & Anandan, J. Phase change during a cyclic quantum evolution. *Physical Review Letters* **58**, 1593 (1987).
- [12] Samuel, J. & Bhandari, R. General setting for berry's phase. *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2339–2342 (1988).
- [13] Pancharatnam, S. Generalized theory of interference, and its applications. In *Proceedings of the Indian Academy of Sciences-Section A*, vol. 44, 247–262 (Springer, 1956).

- [14] Anandan, J. Non-adiabatic non-abelian geometric phase. *Physics Letters A* **133**, 171–175 (1988).
- [15] Holstein, B. R. The adiabatic theorem and berry's phase. *Am. J. Phys* **57**, 1079–1084 (1989).
- [16] Dirac, P. A. Quantised singularities in the electromagnetic field. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 60–72 (1931).
- [17] Ellinas, D., Barnett, S. & Dupertuis, M.-A. Berry's phase in optical resonance. *Physical Review A* **39**, 3228 (1989).
- [18] Gamliel, D. & Freed, J. H. Berry's geometrical phases in esr in the presence of a stochastic process. *Physical Review A* **39**, 3238 (1989).
- [19] Chu, S.-I., Wu, Z.-C. & Layton, E. Density matrix formulation of complex geometric quantum phases in dissipative systems. *Chemical Physics Letters* **157**, 151–158 (1989).
- [20] Uhlmann, A. A gauge field governing parallel transport along mixed states. *Letters in Mathematical Physics* **21**, 229–236 (1991).
- [21] Sjöqvist, E. *et al.* Geometric phases for mixed states in interferometry. *Physical review letters* **85**, 2845 (2000).
- [22] Filipp, S. & Sjöqvist, E. Off-diagonal geometric phase for mixed states. *Physical review letters* **90**, 050403 (2003).
- [23] Yang, L., Shao, B. & Zou, J. Berry phase of many-body system: time-dependent representation method. *The European Physical Journal D* **66**, 1–4 (2012).
- [24] Griffiths, D. J. & Harris, E. G. *Introduction to quantum mechanics*, vol. 2 (Prentice Hall New Jersey, 1995).
- [25] Sakurai, J. J. & Napolitano, J. *Modern Quantum Mechanics* (Addison Wesley Publishing Company Incorporated, 2010).
- [26] Xiao, D., Chang, M.-C. & Niu, Q. Berry phase effects on electronic properties. *Reviews of modern physics* **82**, 1959 (2010).
- [27] Zhu, S., Wang, Z. & Zhang, Y. Nonadiabatic noncyclic geometric phase of a spin-1/2. *Condens. Matter* **102**, 153 (1997).
- [28] de Polavieja, G. G. Noncyclic geometric phase shift for quantal revivals. *Physical review letters* **81**, 1 (1998).
- [29] Mostafazadeh, A. Noncyclic geometric phase and its non-abelian generalization. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **32**, 8157 (1999).

- [30] Zhu, S.-L. & Wang, Z. Nonadiabatic noncyclic geometric phase and ensemble average spectrum of conductance in disordered mesoscopic rings with spin-orbit coupling. *Physical review letters* **85**, 1076 (2000).
- [31] Zhu, S.-L., Wang, Z. & Zhang, Y.-D. Nonadiabatic noncyclic geometric phase of a spin-1/2 particle subject to an arbitrary magnetic field. *Physical Review B* **61**, 1142 (2000).
- [32] Thomaz, M., Aguiar Pinto, A. & Moutinho, M. Contribution of adiabatic phases to noncyclic evolution. *Brazilian Journal of Physics* **40**, 180–183 (2010).
- [33] Filipp, S., Hasegawa, Y., Loidl, R. & Rauch, H. Noncyclic geometric phase due to spatial evolution in a neutron interferometer. *Physical Review A* **72**, 021602 (2005).
- [34] Resta, R. Manifestations of berry's phase in molecules and condensed matter. *Journal of Physics: Condensed Matter* **12**, R107 (2000).
- [35] Zhang, Y., Tan, Y.-W., Stormer, H. L. & Kim, P. Experimental observation of the quantum hall effect and berry's phase in graphene. *Nature* **438**, 201–204 (2005).
- [36] Young, A. F., Zhang, Y. & Kim, P. Experimental manifestation of berry phase in graphene. In *Physics of Graphene*, 3–27 (Springer, 2014).
- [37] Liu, Y., Bian, G., Miller, T. & Chiang, T.-C. Visualizing electronic chirality and berry phases in graphene systems using photoemission with circularly polarized light. *Physical review letters* **107**, 166803 (2011).
- [38] Pal, B. K., Pal, S. & Basu, B. The berry phase in inflationary cosmology. *Classical and Quantum Gravity* **30**, 125002 (2013).
- [39] Youlin, W. & Guangda, M. Berry phase of spinor fields induced by gravity and inertia. *Chinese Physics Letters* **12**, 193 (1995).
- [40] Cai, Y. & Papini, G. Applying berry's phase to problems involving weak gravitational and inertial fields. *Classical and quantum gravity* **7**, 269–275 (1990).
- [41] Nikam, R., Ring, P., Sun, Y. & Marshalek, E. Berry's phase on a quantized path. an example from nuclear physics. *Physics Letters B* **235**, 215–220 (1990).
- [42] Jordan, T. F. Direct calculation of the berry phase for spins and helicities. *Journal of mathematical physics* **28**, 1759–1760 (1987).
- [43] Laia, J. N. Non-abelian berry phase, instantons and $n=(0, 4)$ supersymmetry. *arXiv preprint arXiv:1003.4751* (2010).
- [44] Tomita, A. & Chiao, R. Y. Observation of berry's topological phase by use of an optical fiber. *Physical review letters* **57**, 937 (1986).

- [45] Bitter, T. & Dubbers, D. Manifestation of berry's topological phase in neutron spin rotation. *Physical review letters* **59**, 251 (1987).
- [46] Moody, J., Shapere, A. & Wilczek, F. Realizations of magnetic-monopole gauge fields: Diatoms and spin precession. *Physical review letters* **56**, 893 (1986).
- [47] Suter, D., Chingas, G. C., Harris, R. A. & Pines, A. Berry's phase in magnetic resonance. *Molecular Physics* **61**, 1327–1340 (1987).
- [48] Leibfried, D. *et al.* Experimental demonstration of a robust, high-fidelity geometric two ion-qubit phase gate. *Nature* **422**, 412–415 (2003).
- [49] Calarco, T., Dorner, U., Julienne, P., Williams, C. & Zoller, P. Quantum computations with atoms in optical lattices: Marker qubits and molecular interactions. *Physical Review A* **70**, 012306 (2004).
- [50] Imai, H. & Morinaga, A. Geometric manipulation of the population probability of two-level atoms and hybrid unitary operations of quantum states. *Physical Review A* **76**, 062111 (2007).
- [51] Sjöqvist, E. A new phase in quantum computation. *Physics* **1** (2008).
- [52] Dajka, J., Łuczka, J. & Hänggi, P. Geometric phase as a determinant of a qubit–environment coupling. *Quantum Information Processing* **10**, 85–96 (2011).
- [53] Gu, Z.-Y. & Qian, S.-W. Remark on relations between different non-integrable phases. *Commun. Theor. Phys.(Beijing, China)* **43**, 89–91 (2005).
- [54] Guidorizzi, H. *Um curso de cálculo*. No. v. 3 in *Um curso de cálculo* (Editora LTC, Rio de Janeiro, 2002).
- [55] Garg, A. Berry phases near degeneracies: Beyond the simplest case. *American Journal of Physics* **78**, 661–670 (2010).
- [56] Everschor-Sitte, K. & Sitte, M. Real-space berry phases: Skyrmion soccer. *Journal of Applied Physics* **115**, 172602 (2014).
- [57] von Bergmann, J. & von Bergmann, H. Foucault pendulum through basic geometry. *American Journal of Physics* **75**, 888–892 (2007).
- [58] Gottlieb, D. H. All the way with gauss-bonnet and the sociology of mathematics. *American Mathematical Monthly* 457–469 (1996).
- [59] Born, M. & Fock, V. Beweis des adiabatsatzes. *Zeitschrift für Physik* **51**, 165–180 (1928).
- [60] A. Bohm, H. K. Q. N., A. Mostafazadeh & Zwanziger, J. *The Geometric Phase in Quantum Systems: Foundations, Mathematical Concepts, and Applications in Molecular and Condensed Matter Physics* (2003).

- [61] Ehrenfest, P. *Proc. Amst. Acad.* **v.19**, p.576 (1916).
- [62] Herzberg, G. & Longuet-Higgins, H. Intersection of potential energy surfaces in polyatomic molecules. *Discuss. Faraday Soc.* **35**, 77–82 (1963).
- [63] Longuet-Higgins, H. The intersection of potential energy surfaces in polyatomic molecules. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **344**, 147–156 (1975).
- [64] Stone, A. Spin-orbit coupling and the intersection of potential energy surfaces in polyatomic molecules. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **351**, 141–150 (1976).
- [65] Mead, C. A. & Truhlar, D. G. On the determination of born–oppenheimer nuclear motion wave functions including complications due to conical intersections and identical nuclei. *The Journal of Chemical Physics* **70**, 2284–2296 (1979).
- [66] Kato, T. On the adiabatic theorem of quantum mechanics. *Journal of the Physical Society of Japan* **5**, 435–439 (1950).
- [67] Lenard, A. Adiabatic invariance to all orders. *Annals of Physics* **6**, 261–276 (1959).
- [68] de Azcárraga, J. & Navarro, L. On the spinning axis representation. *Journal of Mathematical Physics* **16**, 243–246 (1975).
- [69] Fulling, S. Adiabatic expansions of solutions of coupled second- order linear differential equations. i. *Journal of Mathematical Physics* **16**, 875–883 (1975).
- [70] Hagedorn, G. A. Adiabatic expansions near eigenvalue crossings. *Annals of Physics* **196**, 278–295 (1989).
- [71] Nenciu, G. Linear adiabatic theory. exponential estimates. *Communications in mathematical physics* **152**, 479–496 (1993).
- [72] Budich, J. C. & Trauzettel, B. From the adiabatic theorem of quantum mechanics to topological states of matter. *physica status solidi (RRL)-Rapid Research Letters* **7**, 109–129 (2013).
- [73] Pinto, A. A., Nemes, M., de Faria, J. P. & Thomaz, M. Comment on the adiabatic condition. *American Journal of Physics* **68**, 955 (2000).
- [74] Aguiar Pinto, A., Fonseca Romero, K. & Thomaz, M. Adiabatic approximation in the density matrix approach: non-degenerate systems. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **311**, 169–187 (2002).
- [75] Tong, D. M., Singh, K., Kwek, L. C. & Oh, C. H. Sufficiency criterion for the validity of the adiabatic approximation. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 150402 (2007).

- [76] Chirkov, A. On the adiabatic theorem in quantum mechanics. *Technical Physics Letters* **27**, 93–96 (2001).
- [77] Zhao, Y. Reexamination of the quantum adiabatic theorem. *Phys. Rev. A* **77**, 032109 (2008).
- [78] Marzlin, K.-P. & Sanders, B. C. Inconsistency in the application of the adiabatic theorem. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 160408 (2004).
- [79] Tao, Y. Sufficient condition for validity of quantum adiabatic theorem. *arXiv preprint arXiv:1010.1326* (2010).
- [80] Li, D. & Yung, M.-H. Why the quantitative condition fails to reveal quantum adiabaticity. *New Journal of Physics* **16**, 053023 (2014).
- [81] Ortigoso, J. Quantum adiabatic theorem in light of the marzlin-sanders inconsistency. *Physical Review A* **86**, 032121 (2012).
- [82] Du, J. *et al.* Experimental study of the validity of quantitative conditions in the quantum adiabatic theorem. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 060403 (2008).
- [83] Kuratsuji, H. & Iida, S. Effective action for adiabatic process dynamical meaning of berry and simon's phase. *Progress of theoretical physics* **74**, 439–445 (1985).
- [84] Messiah, A. *Quantum mechanics* (Courier Dover Publications, New York, 2014).
- [85] *Quantum mechanics*. International series in pure and applied physics (McGraw-Hill Education (India) Pvt Limited, 1968).
- [86] Churchill, R. V. *Fourier series and boundary value problems*. Library of Operational Mathematics (McGraw-Hill, 1963).
- [87] Lemos, N. *Convite a Física Matemática* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2013).
- [88] Rigolin, G. & Ortiz, G. Adiabatic perturbation theory and geometric phases for degenerate systems. *Physical review letters* **104**, 170406 (2010).
- [89] Rigolin, G. & Ortiz, G. Adiabatic theorem for quantum systems with spectral degeneracy. *Physical Review A* **85**, 062111 (2012).
- [90] Feynman, R. P. & Hibbs, A. R. *Quantum mechanics and path integrals: Emended edition* (Dover Publications, New York, 2012).
- [91] Kuratsuji, H. Geometric canonical phase factors and path integrals. *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1687–1690 (1988).
- [92] Zheng-chuan, W. & Bo-zang, L. Geometric phase in path integral and quantisation rule. *Chinese physics letters* **16**, 241 (1999).

- [93] Claude Cohen-Tannoudji, B. *Quantum Mechanics Volume 1* (Hermann and by Wiley & Sons, French, 1977).
- [94] Peskin, M. E. & Schroeder, D. V. *An introduction to quantum field theory* (Westview, 1995).
- [95] Zettili, N. *Quantum mechanics: concepts and applications* (John Wiley & Sons, 2009).
- [96] Brihaye, Y. & Kosiński, P. Adiabatic approximation and berry's phase in the heisenberg picture. *Physics Letters A* **195**, 296–300 (1994).
- [97] Ehrenberg, W. & Siday, R. The refractive index in electron optics and the principles of dynamics. *Proceedings of the Physical Society. Section B* **62**, 8 (1949).
- [98] Chambers, R. Shift of an electron interference pattern by enclosed magnetic flux. *Physical Review Letters* **5**, 3–5 (1960).
- [99] Gerry, C. C. & Singh, V. A. Feynman path-integral approach to the aharonov-bohm effect. *Physical Review D* **20**, 2550 (1979).
- [100] Berry, M. Exact aharonov-bohm wavefunction obtained by applying dirac's magnetic phase factor. *European Journal of Physics* **1**, 240 (1980).
- [101] Zhu, X. & Henneberger, W. C. Some observations on the dynamics of the aharonov-bohm effect. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **23**, 3983 (1990).
- [102] Osakabe, N. *et al.* Experimental confirmation of aharonov-bohm effect using a toroidal magnetic field confined by a superconductor. *Physical Review A* **34**, 815 (1986).
- [103] Tonomura, A. *et al.* Observation of aharonov-bohm effect by electron holography. *Physical Review Letters* **48**, 1443 (1982).
- [104] Tonomura, A. *et al.* Evidence for aharonov-bohm effect with magnetic field completely shielded from electron wave. *Physical Review Letters* **56**, 792 (1986).
- [105] Ballesteros, M. & Weder, R. The aharonov-bohm effect and tonomura *et al.* experiments: Rigorous results. *Journal of Mathematical Physics* **50**, 122108 (2009).
- [106] Aharonov, Y. & Casher, A. Topological quantum effects for neutral particles. *Phys. Rev. Lett.* **53**, 319–321 (1984).
- [107] Cimino, A. *e.* *Physical Review Letters* **63**, 380 (1989).
- [108] Sangster, K., Hinds, E., Barnett, S. M. & Riis, E. Measurement of the aharonov-casher phase in an atomic system. *Physical Review Letters* **71**, 3641–3644 (1993).
- [109] Sangster, K., Hinds, E., Barnett, S. M., Riis, E. & Sinclair, A. Aharonov-casher phase in an atomic system. *Physical Review A* **51**, 1776–1786 (1995).

- [110] Görlitz, A., Schuh, B. & Weis, A. Measurement of the aharonov-casher phase of aligned rb atoms. *Physical Review-Section A-Atomic Molecular and Optical Physics* **51**, R4305 (1995).
- [111] Zeiske, K., Zinner, G., Riehle, F. & Helmcke, J. Atom interferometry in a static electric field: Measurement of the aharonov-casher phase. *Applied Physics B* **60**, 205–209 (1995).
- [112] Yanagimachi, S., Kajiro, M., Machiya, M. & Morinaga, A. Direct measurement of the aharonov-casher phase and tensor stark polarizability using a calcium atomic polarization interferometer. *Physical Review A* **65**, 042104 (2002).
- [113] Gillot, J., Lepoutre, S., Gauguet, A., Vigué, J. & Büchner, M. Measurement of the aharonov-casher geometric phase with a separated-arm atom interferometer. *arXiv preprint arXiv:1312.3453* (2013).
- [114] He, X.-G. & McKellar, B. H. Topological phase due to electric dipole moment and magnetic monopole interaction. *Physical Review A* **47**, 3424–3424 (1993).
- [115] Wilkens, M. Quantum phase of a moving dipole. *Phys. Rev. Lett.* **72**, 5–8 (1994).
- [116] Wei, H., Han, R. & Wei, X. Quantum phase of induced dipoles moving in a magnetic field. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2071–2073 (1995).
- [117] Lepoutre, S., Gauguet, A., Tréneç, G., Büchner, M. & Vigué, J. He-mckellar-wilkens topological phase in atom interferometry. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 120404 (2012).
- [118] Gillot, J., Lepoutre, S., Gauguet, A., Büchner, M. & Vigué, J. Measurement of the he-mckellar-wilkens topological phase by atom interferometry and test of its independence with atom velocity. *Phys. Rev. Lett.* **111**, 030401 (2013).
- [119] He, X.-G. & McKellar, B. H. Topological effects, dipole moments, and the dual current in 2+ 1 dimensions. *Physical Review A* **64**, 022102 (2001).
- [120] He, X.-G. & McKellar, B. H. Magnetic properties of scalar particles—the scalar aharonov–casher effect and supersymmetry. *Physics Letters B* **559**, 263–269 (2003).
- [121] Ericsson, M. & Sjöqvist, E. Towards a quantum hall effect for atoms using electric fields. *Phys. Rev. A* **65**, 013607 (2001).
- [122] Anandan, J. Classical and quantum interaction of the dipole. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1354–1357 (2000).
- [123] Goldhaber, A. S. & Trower, W. P. Resource letter mm-1: Magnetic monopoles. *American Journal of Physics* **58**, 429–439 (1990).
- [124] Castelnovo, C., Moessner, R. & Sondhi, S. L. Magnetic monopoles in spin ice. *Nature* **451**, 42–45 (2008).

- [125] Morris, D. *et al.* Dirac strings and magnetic monopoles in the spin ice $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$. *Science* **326**, 411–414 (2009).
- [126] Chuang, I., Yurke, B., Durrer, R. & Turok, N. Cosmology in the laboratory- defect dynamics in liquid crystals. *Science* **251**, 1336–1342 (1991).
- [127] Fang, Z. *et al.* The anomalous hall effect and magnetic monopoles in momentum space. *Science* **302**, 92–95 (2003).
- [128] Milde, P. *et al.* Unwinding of a skyrmion lattice by magnetic monopoles. *Science* **340**, 1076–1080 (2013).
- [129] Ray, M., Ruokokoski, E., Kandel, S., Möttönen, M. & Hall, D. Observation of dirac monopoles in a synthetic magnetic field. *Nature* **505**, 657–660 (2014).
- [130] Pietilä, V. & Möttönen, M. Creation of dirac monopoles in spinor bose-einstein condensates. *Physical review letters* **103**, 030401 (2009).
- [131] Griffiths, D. J. & College, R. *Introduction to electrodynamics*, vol. 3 (prentice Hall Upper Saddle River, NJ, 1999).
- [132] Machado, K. *Eletromagnetismo*. v. 2 (Toda Palavra, Ponta Grossa - Paraná, 2013).
- [133] Mignaco, J. A. Electromagnetic duality, charges, monopoles, topology,... *Brazilian Journal of Physics* **31**, 235–246 (2001).
- [134] Datta, S. Multipole expansion of the interaction hamiltonian between a charged particle and a non-uniform magnetic field. *European Journal of Physics* **5**, 243 (1984).
- [135] Jefimenko, O. D. Direct calculation of electric and magnetic forces from potentials. *American Journal of Physics* **58**, 625–631 (1990).
- [136] Afanasiev, G. Static and nonstatic electrical solenoids. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **26**, 731 (1993).
- [137] Yamashita, O. & Tomiyoshi, S. Aharonov–bohm effect of a magnetic fluxon moving ballistically in a two-dimensional ring. *Physics Letters A* **309**, 138–145 (2003).
- [138] Iencinella, D. & Matteucci, G. An introduction to the vector potential. *European journal of physics* **25**, 249 (2004).
- [139] Lemos, N. A. *Mecânica analítica* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2007).
- [140] Zill, D. G., Wright, W. S. & Cullen, M. R. *Differential equations with boundary-value problems* (Cengage Learning, 2012).
- [141] Feynman, R. P. Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics. *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367–387 (1948).

- [142] Beau, M. Feynman path integral approach to electron diffraction for one and two slits: analytical results. *European Journal of Physics* **33**, 1023 (2012).
- [143] Schulman, L. S. Approximate topologies. *Journal of Mathematical Physics* **12**, 304–308 (1971).
- [144] Kobe, D. H. Aharonov-bohm effect revisited. *Annals of physics* **123**, 381–410 (1979).
- [145] Shapiro, D. & Henneberger, W. The aharonov-bohm effect in double-and single-slit diffraction. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **22**, 3605 (1989).
- [146] Dirac, P. A. The lagrangian in quantum mechanics. *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion* **3**, 64–72 (1933).
- [147] Churchill, R. V. *Variáveis complexas e suas aplicações* (McGraw-Hill do Brasil, 1980).
- [148] Boyer, T. H. Classical electromagnetic deflections and lag effects associated with quantum interference pattern shifts: considerations related to the aharonov-bohm effect. *Physical Review D* **8**, 1679 (1973).
- [149] Jönsson, C. Elektroneninterferenzen an mehreren künstlich hergestellten feinspalten. *Zeitschrift für Physik* **161**, 454–474 (1961).
- [150] Zeilinger, A., Gähler, R., Shull, C., Treimer, W. & Mampe, W. Single-and double-slit diffraction of neutrons. *Reviews of modern physics* **60**, 1067 (1988).
- [151] Pfleegor, R. & Mandel, L. Interference of independent photon beams. *Physical Review* **159**, 1084 (1967).
- [152] Alonso, M., Finn, E., Nascimento, I. & Hennes, C. *Física: um curso universitário, volume II - Campos e ondas* (Edgard Blucher, São Paulo, 1972).