Fases de Berry*

David A. Ruiz Tijerina

November 11, 2015

1 Evolução temporal de um autoestado e a fase de Berry

Vamos supor que temos um Hamiltoniano $H(R)$ que depende de um conjunto de parámetros $R = \{R_i\}$. A equação de Schrödinger é

$$H(R)\left|n(R)\right\rangle = E_n(R)\left|n(R)\right\rangle, \tag{1}$$

onde $|n(R)\rangle$ são os autoestados para um valor fixo de R. Os parámetros podem variar adiabáticamente no tempo, $R(t) = \{R_i(t)\}$. Dado que a variação é adiabática, em cada instante t temos auto–estados $|\psi_n(t)\rangle \sim |n[R(t)]\rangle$, mas em geral a evolução temporal introduz uma fase:

$$|n(R)\rangle \longrightarrow |\psi_n(t)\rangle = \mathrm{e}^{-i\theta(t)}\left|n[R(t)]\right\rangle.$$

Os estados $|n[R(t)]\rangle$ são autoestados instantáneos, e estão normalizados:

$$\langle n[R(t)]|\, n[R(t)]\rangle = 1. \tag{2}$$

Vamos colocar $|\psi_n(t)\rangle$ na equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$\begin{aligned} H(t)\left|\psi_n(t)\right\rangle = E_n(t)\left|\psi_n(t)\right\rangle =& i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|\psi_n(t)\right\rangle \\ =& \hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\theta(t)\left|\psi_n(t)\right\rangle + i\hbar\mathrm{e}^{-i\theta(t)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|n[R(t)]\right\rangle, \end{aligned}$$

e eliminando o fator $\mathrm{e}^{-i\theta(t)}$

$$E_n(t)\left|n[R(t)]\right\rangle = \hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\theta(t)\left|n[R(t)]\right\rangle + i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|n[R(t)]\right\rangle. \tag{3}$$

O produto escalar com $\langle n[R(t)]|$ da

$$\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\theta(t) = E_n(t) - i\hbar\,\left\langle n[R(t)]\right|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|n[R(t)]\right\rangle, \tag{4}$$

*Quase verbatim do livro do A. Bernevig, Ref. [1], mas com erros corrigidos.

que pode ser integrada entre os tempos $t = 0$ e t para obter

$$\theta(t) = \frac{1}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t'\, E_n(t') - i\int_0^t \mathrm{d}t'\, \langle n[R(t')]| \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'} |n[R(t')]\rangle\,. \tag{5}$$

O segundo tem a ver com a variação dos parámetros, e aparece com uma dependência explícita da variação temporal. Este termo é conhecido como a fase de Berry:

$$\gamma_n = -i\int_0^t \mathrm{d}t'\, \langle n[R(t)]| \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |n[R(t)]\rangle\,. \tag{6}$$

Sabemos que a dependência temporal explícita pode ser evitada, dado que estamos trabalhando no caso adiabático:

$$\begin{aligned}\int_0^t \mathrm{d}t'\, \langle n[R(t)]| \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |n[R(t)]\rangle &= \sum_i \int_0^t \mathrm{d}t' \frac{\partial R_i}{\partial t}\, \langle n[R(t)]| \frac{\partial}{\partial R_i} |n[R(t)]\rangle \\ &= \int_{\mathcal{C}} \mathrm{d}\boldsymbol{R}\cdot\, \langle n[R(t)]| \nabla_{\boldsymbol{R}} |n[R(t)]\rangle\,,\end{aligned} \tag{7}$$

onde consideramos o conjunto de parámetros como um vetor $\boldsymbol{R}$, e a integral virou uma integral de linha no espaço de parámetros. Este tipo de integrais aparecem quando se consideram campos eletromagnéticos em problemas de mecânica quântica. Por exemplo, estudando o interferómetro de Aharonov–Bohm obtemos que a evolução temporal involve uma fase[2]

$$e\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{r}\cdot A(\boldsymbol{r}),$$

onde $\boldsymbol{r}$ é o vetor posição , e a carga do elétron, $A(\boldsymbol{r})$ é o potencial magnético, e Γ é a trajetória do elétron no espaço. Fazendo uma analogia com esse caso, podemos definir um potencial vetor $A(\boldsymbol{R})$, chamado potencial de Berry, e escrever

$$\gamma_n = \int_{\mathcal{C}} \mathrm{d}\boldsymbol{R}\cdot\, A_n(\boldsymbol{R}), \tag{8}$$

onde

$$A_n(\boldsymbol{R}) = -i\,\langle n[R(t)]| \nabla_{\boldsymbol{R}} |n[R(t)]\rangle\,. \tag{9}$$

Assim, o estado $|\psi_n(t)\rangle$ é dado por

$$|\psi_n(t)\rangle = \mathrm{e}^{-i\gamma_n - \frac{i}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t'\, E_n(t')}\, |n[R(t)]\rangle\,. \tag{10}$$

Imediatamente temos que perguntarmos: o quê acontece quando γ_n é imaginário? O estado decai com o tempo? A resposta é que γ_n sempre é real, porque $A_n(R)$ sempre é real:

$$\begin{aligned}\nabla_{\boldsymbol{R}}\,\langle n[R(t)]|\, n[R(t)]\rangle &= 0 \\ &= \langle \nabla_{\boldsymbol{R}} n[R(t)]|\, n[R(t)]\rangle + \langle n[R(t)]|\, \nabla_{\boldsymbol{R}} n[R(t)]\rangle \\ &\iff \langle n[R(t)]|\, \nabla_{\boldsymbol{R}} n[R(t)]\rangle = -\,\langle n[R(t)]|\, \nabla_{\boldsymbol{R}} n[R(t)]\rangle^* \\ &\iff \langle n[R(t)]|\, \nabla_{\boldsymbol{R}} n[R(t)]\rangle \text{ é imaginário,} \\ &\Rightarrow A_n(\boldsymbol{R}) = -i\,\langle n[R(t)]|\, \nabla_{\boldsymbol{R}} n[R(t)]\rangle \text{ é real.}\end{aligned}$$

1.1 A fase de Berry como integral de superficie

Vamos ver o quê acontece quando a trajetória $\mathcal{C}$ é uma curva fechada no espaço das fases, *i.e.*, quando para o tempo final t temos $\boldsymbol{R}(t) = \boldsymbol{R}(0)$. Suponhamos que $\boldsymbol{R}$ é tridimensional. Podemos utilizar o teorema de Stokes na integral Eq. (8), e obter (somando sobre índices repetidos)

$$\begin{aligned}
\gamma_n =& \int_{\Sigma(\mathcal{C})} \mathrm{d}\boldsymbol{S} \cdot \nabla_{\boldsymbol{R}} \times \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R}) \\
=& - i \int_{\Sigma(\mathcal{C})} \mathrm{d}\boldsymbol{S} \cdot \nabla_{\boldsymbol{R}} \times \langle n[\boldsymbol{R}] | \, \nabla_{\boldsymbol{R}} n[\boldsymbol{R}] \rangle \\
=& - i \int_{\Sigma(\mathcal{C})} \mathrm{d}S_i \, \epsilon_{ijk} \left[\partial_{R_j} \langle n(\boldsymbol{R}) | \, \partial_{R_k} n(\boldsymbol{R}) \rangle \right] \\
=& - i \int_{\Sigma(\mathcal{C})} \mathrm{d}S_i \, \epsilon_{ijk} \left[\left\langle \partial_{R_j} n(\boldsymbol{R}) \right| \partial_{R_k} n(\boldsymbol{R}) \rangle + \langle n(\boldsymbol{R}) | \, \partial_{R_j} \partial_{R_k} n(\boldsymbol{R}) \rangle \right] \qquad (11) \\
=& - i \int_{\Sigma(\mathcal{C})} \mathrm{d}S_i \, \epsilon_{ijk} \left\langle \partial_{R_j} n(\boldsymbol{R}) \right| \partial_{R_k} n(\boldsymbol{R}) \rangle \\
=& - i \int_{\Sigma(\mathcal{C})} \mathrm{d}\boldsymbol{S} \cdot \langle \nabla_{\boldsymbol{R}} n[\boldsymbol{R}] | \times | \nabla_{\boldsymbol{R}} n[\boldsymbol{R}] \rangle \\
=& - i \int_{\Sigma(\mathcal{C})} \mathrm{d}\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{F}(\boldsymbol{R}).
\end{aligned}$$

onde $\Sigma(\mathcal{C})$ é una superficie subtendida pela curva $\mathcal{C}$. Nóte–se que, em analogia com eletromagnetismo, $\boldsymbol{F} = \nabla \times \boldsymbol{A}$ é um tipo de campo magnético (na verdade, um campo de *gauge*). Escrevendo-o em termos do tensor de Levi-Civita:

$$F_i(\boldsymbol{R}) = \epsilon_{ijk} \, \left\langle \partial_{R_j} n[\boldsymbol{R}] \right| \partial_{R_k} n[\boldsymbol{R}] \rangle = \epsilon_{ijk} \, F_{jk}(\boldsymbol{R}), \qquad (12)$$

onde o tensor F_{jk} é conhecido como a curvatura de Berry.

2 Exemplo: Sistemas de dois Níveis

O Hamiltoniano de tudo sistema de dois níveis é representado com uma matriz 2×2, e tuda matriz 2×2 pode ser escrita como

$$H = \varepsilon(\boldsymbol{R})\sigma_0 + \boldsymbol{d}(\boldsymbol{R}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \varepsilon(\boldsymbol{R}) + d_z(\boldsymbol{R}) & d_x(\boldsymbol{R}) - i d_y(\boldsymbol{R}) \\ d_x(\boldsymbol{R}) + i d_y(\boldsymbol{R}) & \varepsilon(\boldsymbol{R}) - d_z(\boldsymbol{R}), \end{pmatrix} \qquad (13)$$

onde $\sigma_0 = 1_{2\times 2}$, e $\boldsymbol{d}$ é um vetor (real) de três dimensões . O Hamiltoniano pode ser diagonalizado fácilmente:

$$\left[H - \varepsilon(\boldsymbol{R})\sigma_0 \right]^2 = d^2(\boldsymbol{R})\sigma_0, \qquad (14)$$

e os auto–valores sáo

$$E_\pm(\boldsymbol{R}) = \varepsilon(\boldsymbol{R}) \pm \sqrt{d^2(\boldsymbol{R})}. \qquad (15)$$

Os auto–estados correspondentes são:

$$|E_-\rangle = [2d\,(d+d_z)]^{-1/2}\begin{pmatrix}-d_x+id_y\\ d_z+d\end{pmatrix}, \tag{16a}$$

$$|E_+\rangle = [2d\,(d+d_z)]^{-1/2}\begin{pmatrix}d_z+d\\ d_x+id_y\end{pmatrix}, \tag{16b}$$

independentes de $\varepsilon(\boldsymbol{R})$. Vamos nos focar no caso específico no qual $\varepsilon(\boldsymbol{R})=0$, $\boldsymbol{d}(\boldsymbol{R})=\hbar v_F\boldsymbol{R}$, e $\boldsymbol{R}$ é o momentum $\boldsymbol{k}$. O Hamiltoniano Eq. (13) vira o modelo de Férmions de Weyl

$$H_W = \hbar v_f\,\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\sigma}, \tag{17}$$

com duas bandas

$$E_\pm(\boldsymbol{k}) = \pm\hbar v_F\,k, \tag{18}$$

degeneradas apenas no ponto $k=0$. Vamos calcular a fase de Berry de um elétron que é levado numa curva fechada na zona de Brillouin, ao redor deste ponto de degenerecencia. Para isso precisamos avaliar $\delta_{k_j}\,|E_\pm(\boldsymbol{k})\rangle$.

As derivadas sãm mais simples na representação esférica $\boldsymbol{k}=(k,\theta,\phi)$. Os estados (16) podem ser representados como

$$|E_-(\boldsymbol{k})\rangle = \begin{pmatrix}-\mathrm{e}^{-i\phi}\sin(\theta/2)\\ \cos(\theta/2)\end{pmatrix}, \tag{19a}$$

$$|E_+(\boldsymbol{k})\rangle = \begin{pmatrix}\cos(\theta/2)\\ \mathrm{e}^{i\phi}\sin(\theta/2)\end{pmatrix}, \tag{19b}$$

e temos

$$|\partial_k E_-\rangle = 0, \tag{20a}$$

$$|\partial_\theta E_-\rangle = -\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-i\phi}\cos(\theta/2)\\ \sin(\theta/2)\end{pmatrix}, \tag{20b}$$

$$|\partial_\phi E_-\rangle = i\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-i\phi}\sin(\theta/2)\\ 0\end{pmatrix}, \tag{20c}$$

e por tanto

$$\langle E_-|\,\partial_k E_-\rangle = 0, \tag{21a}$$

$$\langle E_-|\,\partial_\theta E_-\rangle = 0, \tag{21b}$$

$$\langle E_-|\,\partial_\phi E_-\rangle = -i\sin^2(\theta/2). \tag{21c}$$

As componentes do potencial de Berry no sistema esférico são

$$A_k(\boldsymbol{k}) = 0, \tag{22a}$$

$$A_\theta(\boldsymbol{k}) = 0, \tag{22b}$$

$$A_\phi(\boldsymbol{k}) = -\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right). \tag{22c}$$

Finalmente, as única componentes do tensor de curvatura são

$$F_{\theta\phi} = -F_{\phi\theta} = -\frac{\sin(\theta)}{2}. \tag{23}$$

Em coordenadas cartesianas, o vetor do campo de Berry é (verifiquem)

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{k}) = -\frac{1}{2}\frac{\boldsymbol{k}}{k^3}. \tag{24}$$

Claramente temos um monopolo no ponto de degenerecencia $k = 0$. O cálculo da fase de Berry pode ser feito utilizando o teorema de Gauss: se a curva fechada contém $k = 0$, a fase de Berry $\gamma_- = -2\pi$; no caso contrário, $\gamma_+ = 0$.

O quê acontece com a fase γ_+? O quê nos diz esse análise sobre a natureza de um sistema de férmions de Weyl?

References

[1] B. A. Bernevig and T. L. Hughes, *Topological insulators and topological superconductors*. Princeton University Press, 2013.

[2] Y. Aharonov and D. Bohm, "Significance of electromagnetic potentials in quantum theory," *Phys. Rev.*, vol. 115, p. 458, 1959.