Fases Adiabáticas não cíclicas em modelos Fermiônicos de dois níveis com interação de dois campos clássicos externos de mesma frequência

Rafael Fagundes Borges Silva[1]**; Antonio Cesar Aguiar Pinto**[2]

[1]Estudante do Curso de Física da UEMS, Unidade Universitária de Dourados; E-mail: rafaelparadox@hotmail.com, bolsista de iniciação científica PIBIC/UEMS 2010/11.
[2]Professor do Curso de Física da UEMS, Unidade Universitária de Dourados; E-mail: acap@uems.br

Ciências Exatas e da Terra - Física - Física Clássica e Física Quântica; Mecânica e Campos

1 Resumo

No projeto de iniciação científica desenvolvido anteriormente, estudamos um modelo de dois níveis fermiônicos sob a interação de dois campos clássicos externos, um magnético e um elétrico. Para campos gerais, encontramos os autovalores e autoenergias respectivas desse modelo. Para estudar a dinâmica adiabática desse modelo, restringimos o campo magnético a um campo, de norma constante, que precessiona em torno de uma direção fixa no espaço com frequência constante e o campo elétrico a ter a mesma frequência angular do campo magnético. Encontramos nesse regime, as fases geométricas quando os dois campos voltam as mesmas configurações iniciais após um período.

Nesse novo projeto, obtivemos a dinâmica exata desse modelo para as mesmas configurações de campos externos do projeto anterior sem fazer a restrição ao regime adiabático e reobtivemos os resultados das fases geométricas adquiridas pelos autoestados da hamiltoniana, quando implementamos a aproximação adiabática.

2 Introdução

Quando estudamos sistemas fermiônicos com poucos graus de liberdade é possível calcular, sob condições iniciais gerais, a dinâmica exata desses sistemas. O modelo fermiônico com dois ou três sítios espaciais tem sido utilizado para descrever as propriedades ópticas de sais orgânicos que possuem transferência de carga elétrica, veja as referências (RICE, 1979;

RICE; YARTSEV; JACOBSEN, 1980; LIEBSCH; ISHIDA; MERINO, 2009; MERINO et al., 2008). Esse fato torna importante o estudo de tais modelos fermiônicos.

As fases globais em Mecânica Quântica (MQ) são irrelevantes, pois os valores médios de quantidades físicas dependem do módulo ao quadrado da função de onda complexa que descreve o sistema quântico. Entretanto, fases relativas entre estados quânticos de um sistema, ao contrário das fases globais, geram o importante fenômeno de interferência. Este fenômeno de interferência pode ser medido experimentalmente.

As fases geométricas ou fases de Berry estão associadas a fases que os estados quânticos adquirem (além da fase devido à dinâmica) ao evoluir no tempo num regime adiabático durante um ciclo fechado dos parâmetros clássicos que caracterizam a evolução do sistema quântico (BERRY, 1984).

A seguir, descrevemos em detalhes o modelo a ser estudado.

2.1 O Modelo Fermiônico de dois níveis

Seja o sistema de dois níveis que descreve o elétron atômico (férmion) representado pela hamiltoniana $\mathbf{H}_e$. O elétron atômico interage com um campo elétrico externo clássico $\vec{E}_{clas}(t)$ e seu *spin* interage com um campo magnético externo dependente do tempo $\vec{\mathbf{B}}(t)$. A hamiltoniana total para este modelo na representação de Schrödinger é (AGUIAR PINTO; THOMAZ; BRUNO, 2002)

$$\mathbf{H}_T(t) = \mathbf{H}_e + \mathbf{H}_{int}(t), \tag{1}$$

com

$$\mathbf{H}_e = \frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(r), \tag{2}$$

e

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{int}(t) &\equiv -e\Big(\vec{E}_{clas}(t)\Big)\cdot\vec{\mathbf{r}} + \lambda[B_x(t)(\mathbf{a}_\downarrow^\dagger\mathbf{a}_\uparrow + \mathbf{a}_\uparrow^\dagger\mathbf{a}_\downarrow) + \\ &+ iB_y(t)(\mathbf{a}_\downarrow^\dagger\mathbf{a}_\uparrow - \mathbf{a}_\uparrow^\dagger\mathbf{a}_\downarrow) + B_z(t)(\mathbf{n}_\uparrow - \mathbf{n}_\downarrow)], \end{aligned} \tag{3}$$

onde $\vec{\mathbf{P}}$ é o operador de momento associado ao elétron atômico, $V(r)$ é o potencial de interação entre o elétron e o resto do átomo esfericamente simétrico por hipótese, $\mathbf{a}_\sigma^\dagger$ e $\mathbf{a}_\sigma$ são, respectivamente, os operadores de criação e de destruição de uma partícula de componente de *spin* σ. Os operadores de criação e de destruição fermiônicos satisfazem as regras de anticomutação:

$$\{\mathbf{a}_{i\sigma}, \mathbf{a}_{j\sigma'}\} = 0, \qquad \{\mathbf{a}_{i\sigma}^\dagger, \mathbf{a}_{j\sigma'}^\dagger\} = 0 \qquad \text{e} \qquad \{\mathbf{a}_{i\sigma}, \mathbf{a}_{j\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\sigma\sigma'}\delta_{ij}\mathbb{I}. \tag{4}$$

$\mathbf{n}_\sigma = \mathbf{a}_\sigma^\dagger\mathbf{a}_\sigma$ representa o operador número de férmions com componente de *spin* σ. Estamos usando o acoplamento Zeeman para levar em conta a interação entre o campo magnético externo $\vec{\mathbf{B}}(t)$ e o sistema fermiônico, onde $\lambda = \frac{g\mu_B}{2}$, sendo g o fator de Landé, μ_B o magneton de Bohr e $B_x(t)$, $B_y(t)$ e $B_z(t)$ são as três componentes do campo magnético externo.

Os autovalores da hamiltoniana (1) são, sem fazer qualquer restrição sobre os campos externos,

$$\mathcal{E}_{\pm}(t) = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \pm \frac{\Delta(t)}{2}, \tag{5}$$

onde

$$\begin{aligned} \Delta(t) &\equiv \Big\{(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 + 4\lambda^2 B^2(t) + 4e^2 |\vec{E}_{clas}(t) \cdot \vec{d}_{12}|^2 + \\ &+ 4\lambda\Big[B_z(t)(\epsilon_1 - \epsilon_2) - 2B_x(t)\,\mathrm{Re}[-e\vec{E}_{clas}(t) \cdot \vec{d}_{12}] + 2B_y(t)\,\mathrm{Im}[-e\vec{E}_{clas}(t) \cdot \vec{d}_{12}]\Big]\Big\}^{1/2}. \end{aligned} \tag{6}$$

3 Metodologia

Para obter a dinâmica exata desse modelo fermiônico de dois níveis sob a interação de campos externos e a contribuição das chamadas fases adiabáticas, inicialmente, escreveremos a representação de um vetor de estado físico na base completa dos autoestados instantâneos da hamiltoniana (BERRY, 1984):

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^{2} c_j(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\int dt'\, \mathcal{E}_j(t')}\, |u_j; t\rangle, \tag{7}$$

onde $|u_j; t\rangle$ é um autoestado da hamiltoniana (1) com energia $\mathcal{E}_j(t)$.

Os autoestados instantâneos da hamiltoniana (1) são:

$$|u_1; t\rangle = \sqrt{\frac{\Delta(t) + 2\lambda B_z(t) - (\epsilon_2 - \epsilon_1)}{2\Delta(t)}}|\uparrow\rangle + 2\frac{\lambda(B_x(t) + iB_y(t)) - e\vec{E}_{clas}(t) \cdot \vec{d}_{21}}{\sqrt{2\Delta(t)(2\lambda B_z(t) + \Delta(t) - (\epsilon_2 - \epsilon_1))}}|\downarrow\rangle \tag{8}$$

e

$$|u_2; t\rangle = \sqrt{\frac{\Delta(t) - 2\lambda B_z(t) + (\epsilon_2 - \epsilon_1)}{2\Delta(t)}}|\uparrow\rangle - 2\frac{\lambda(B_x(t) + iB_y(t)) - e\vec{E}_{clas}(t) \cdot \vec{d}_{21}}{\sqrt{2\Delta(t)(\Delta(t) - 2\lambda B_z(t) + (\epsilon_2 - \epsilon_1))}}|\downarrow\rangle. \tag{9}$$

Como, em princípio, os coeficientes $c_j(t)$ dependem do tempo e são determinados pela condição de que o vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$, que descreve o sistema quântico, satisfaz a eq. de Schrödinger:

$$\mathbf{H}(t)|\Psi(t)\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle, \tag{10}$$

ao substituir a superposição (7) na eq. (10) obteremos equações diferenciais acopladas entre os coeficientes. Para resolver essas equações diferenciais acopladas, utilizaremos a condição de que o campo magnético externo $\vec{B}(t)$ possui norma constante e precessiona com frequência angular constante ω_0 em torno de uma direção fixa e que

$$-e\vec{d} \cdot \vec{E}_{clas}(t) \equiv \rho e^{-i(\omega_0 t + \phi)} \tag{11}$$

onde ρ e ϕ são constantes positivas.

Para escrever os autoestados instantâneos (8) e (9), escolhemos a base completa

$$|1\rangle \equiv \mathbf{a}_{\uparrow}^{\dagger}|0\rangle \equiv |\uparrow\rangle \qquad\qquad |2\rangle \equiv \mathbf{a}_{\downarrow}^{\dagger}|0\rangle \equiv |\downarrow\rangle \tag{12}$$

que é a base dos autoestados instantâneos de $\mathbf{H}_e$ ($\mathbf{H}_e|i\rangle = \epsilon_i|i\rangle$): e $|0\rangle$ representa o vácuo do sistema fermiônico.

4 Resultados obtidos

Após a obtenção dos autoestados instantâneos da hamiltoniana, descritas nas equações (8) e (9), é possível obter a dinâmica exata desse modelo fermiônico de dois níveis sob a interação de campos externos e a contribuição das chamadas fases adiabáticas.

Assumindo que os coeficientes $c_j(t)$ dependem do tempo e são determinados pela condição de que o vetor de estado $|\Psi(t)\rangle$, que descreve o sistema quântico, satisfaz a eq. de Schrödinger, verifica-se que ao substituir a superposição (7) na eq. (10) obteremos equações diferenciais acopladas entre os coeficientes:

$$\dot{c_n}(t) = -c_n(t)\langle u_m; t \mid \frac{d}{dt} \mid u_n; t\rangle - \sum_{n=1_{n\neq m}}^{2} c_m(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\,(\epsilon_n-\epsilon_m)t}\langle u_m; t \mid \frac{d}{dt} \mid u_n; t\rangle] \tag{13}$$

Usando as expressões dos autoestados (8) e (9) obtemos as seguintes equações diferenciais acopladas:

$$\dot{c_1}(t) = -c_1(t)\frac{2i\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen }\theta)^2}{\Delta[\Delta+2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1)]} + c_2(t)\frac{2i\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen }\theta)^2 e^{\frac{i\Delta t}{\hbar}}}{\Delta[\Delta^2-(2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1))^2]^{\frac{1}{2}}} \tag{14}$$

$$\dot{c_2}(t) = -c_2(t)\frac{2i\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen }\theta)^2}{\Delta[\Delta-2\lambda B\cos\theta+(\epsilon_2-\epsilon_1)]} + c_1(t)\frac{2i\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen }\theta)^2 e^{\frac{-i\Delta t}{\hbar}}}{\Delta[\Delta^2-(2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1))^2]^{\frac{1}{2}}} \tag{15}$$

onde utilizamos a condição de que o campo magnético externo $\vec{B}(t)$ possui norma constante e precessiona com frequência angular constante ω_0 em torno de uma direção fixa, ou seja,

$$\vec{B}(t) = B(\text{sen}\theta\cos(\omega_0 t), \text{sen}\theta\text{sen}(\omega_0 t), \cos\theta)$$

Para simplificar as expressões (14) e (15), definimos novos coeficientes da seguinte forma:

$$c_1(t) = c_1'(t)e^{\frac{i\Delta t}{2\hbar}} \quad ; \quad c_2(t) = c_2'(t)e^{\frac{-i\Delta t}{2\hbar}} \tag{16}$$

Podendo-se chegar facilmente nas seguintes equações diferenciais homogêneas de segunda ordem e de raízes distintas:

$$\ddot{c_1'}(t) + \dot{c_1'}(t)\Big[\frac{i\Delta}{2\hbar} + \frac{2i\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen }\theta)^2}{\Delta[\Delta+2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1)]} + 1\Big] +$$

$$+c_1'(t)\Big[\Big(\frac{i\Delta}{2\hbar}+\frac{2i\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen }\theta)^2}{\Delta[\Delta+2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1)]}\Big)\cdot\Big(\frac{-i\Delta}{2\hbar}+\frac{2i\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen }\theta)^2}{\Delta[\Delta-2\lambda B\cos\theta+(\epsilon_2-\epsilon_1)]}\Big)-B^2\Big]=0$$

e

$$\ddot{c_2'}(t)+\dot{c_2'}(t)\Big[\frac{-i\Delta}{2\hbar}+\frac{2i\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen }\theta)^2}{\Delta[\Delta-2\lambda B\cos\theta+(\epsilon_2-\epsilon_1)]}+1\Big]+$$

$$+c_2'(t)\Big[\Big(\frac{-i\Delta}{2\hbar}+\frac{2i\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen }\theta)^2}{\Delta[\Delta-2\lambda B\cos\theta+(\epsilon_2-\epsilon_1)]}\Big)\cdot\Big(\frac{i\Delta}{2\hbar}+\frac{2i\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen }\theta)^2}{\Delta[\Delta+2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1)]}\Big)-B^2\Big]=0$$

Estas equações formam um sistema de equações acopladas. Com um pouco de álgebra, obtemos as seguintes equações de $c_1(t)$ e $c_2(t)$ em função das constantes $c_1(0)$ e $c_2(0)$ (condições iniciais em $t=0$),

$$\begin{aligned}
c_1(t) &= e^{i\left(\frac{\Delta}{2\hbar}-\frac{2\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen}\theta)^2}{\Delta^2-(2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1))^2}\right)t}\Big[c_1(0)\cos(\delta t)+\\
&+ 2i\text{sen}(\delta t)[\frac{\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen}\theta)^2}{\delta\Delta[\Delta^2-[2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1)]^2]^{\frac{1}{2}}}c_2(0)+\\
&+ [\frac{2\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen}\theta)^2(2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1))}{\Delta[\Delta^2-[2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1)]^2]}-\frac{\Delta}{2\hbar}]\frac{c_1(0)}{2\delta}]\Big] \qquad (17)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c_2(t) &= e^{-i\left(\frac{\Delta}{2\hbar}+\frac{2\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen}\theta)^2}{\Delta^2-(2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1))^2}\right)t}\Big[\frac{i\text{sen}(\delta t)}{\delta}[\frac{2\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen}\theta)^2}{\delta\Delta[\Delta^2-[2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1)]^2]^{\frac{1}{2}}}c_1(0)]+\\
&+ [\cos(\delta t)-\frac{i\text{sen}(\delta t)}{\delta}[\frac{2\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen}\theta)^2(2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1))}{\Delta[\Delta^2-[2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1)]^2]}-\frac{\Delta}{2\hbar}]c_2(0)]\Big] \qquad (18)
\end{aligned}$$

onde

$$\delta=\Big[\frac{4\omega_0^2(\rho+\lambda B\text{sen }\theta)^4}{[\Delta^2-(2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1))^2]^2}+\frac{2\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen}\theta))^2(\epsilon_2-\epsilon_1-2\lambda B\cos\theta)}{\hbar[\Delta^2-(2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1))^2]}+\frac{\Delta^2}{4\hbar^2}\Big]^{\frac{1}{2}} \qquad (19)$$

Os coeficientes (17) e (18) apresentam uma aparência complicada, porém são exatos. Para conferência desses coeficientes, vamos implementar a aproximação adiabática.

A aproximação adiabática é implementada quando $\mid \frac{\hbar\omega_0}{\Delta} \mid << 1$, ou seja, o termo que representa a frequência de Bohr $\frac{\Delta}{\hbar}$ é muito maior do que a frequência dos campos externos ω_0. Nessa aproximação, por exemplo, o termo δ (19)se reduz a:

$$\delta=\Big(\frac{\Delta}{2\hbar}+\frac{2\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen}\theta)^2(\epsilon_2-\epsilon_1-2\lambda B\cos\theta)}{\Delta[\Delta^2-[2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1)]^2]}\Big) \qquad (20)$$

e as equações de $c_1(t)$ e $c_2(t)$ se reduzem a:

$$c_1(t)=e^{i\left(-\frac{2\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen}\theta)^2}{\Delta[\Delta+2\lambda B\cos\theta-(\epsilon_2-\epsilon_1)]}\right)t}c_1(0) \qquad (21)$$

$$c_2(t)=e^{i\left(\frac{2\omega_0(\rho+\lambda B\text{sen}\theta)^2}{\Delta[\Delta-2\lambda B\cos\theta+(\epsilon_2-\epsilon_1)]}\right)t}c_2(0) \qquad (22)$$

os termos no expoente de cada equação são as fases geométricas obtidas no primeiro projeto de iniciação científica quando $t=T=2\pi/\omega_0$.

5 Conclusões

Nesse projeto, calculamos a dinâmica exata do modelo fermiônico de dois níveis que descreve um elétron atômico que interage com um campo elétrico externo clássico $\vec{E}_{clas}(t)$ e seu *spin* interage com um campo magnético externo dependente do tempo, para o caso em que esses dois campos possuem a mesma frequência ω_0. Ao decompor um vetor físico na base completa dos autoestados instantâneos da hamiltoniana, obtivemos os coeficientes exatos nessa base. Esses coeficientes exatos, no regime adiabático $\frac{\hbar\omega}{\Delta} \ll 1$, recaem nos coeficientes obtidos no primeiro projeto quando implementamos desde o começo a aproximação adiabática. Com isso, reobtivemos as fases adiabáticas quando $t = T = 2\pi/\omega_0$.

Agradecimentos

O autor Rafael agradece a Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul pelo suporte financeiro dado através de uma bolsa de Iniciação Científica. Agradece também aos amigos Flávio e Wilson, pelas várias discussões produtivas a respeito do projeto.

Referências Bibliográficas

AGUIAR PINTO, A.C. ; THOMAZ, M.T.; BRUNO, R. 2002. Berry's Phase and Organic Salt with Charge Transfer. **Modern Physics Letters B**, v. 16, p. 57-67.

BERRY, M.V. 1984. Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes. **Proceedings of the Royal Society A**, v. 392, n. 1802, p. 45-57.

LIEBSCH, A., ISHIDA, H; MERINO, J. 2009. Mott transition in two-dimensional frustrated compounds. **Physical Review B**, Sydney, v.79, n. 19, p. 195108-1-4.

MERINO, J *et al.* 2008. Quasiparticles at the Verge of Localization near the Mott Metal-Insulator Transition in a Two-Dimensional Material. **Physical Review Letters**, Sydney, v. 100, n. 8, p. 086404-1-4.

RICE, M. J. 1979. Towards the experimental determination of the fundamental microscopic parameters of organic ion-radical compounds. **Solid State Communications**, v. 31, p. 93-98.

RICE, M. J.; YARTSEV, V. M.; JACOBSEN, C. S. 1980. Investigation of the nature of the unpaired electron states in the organic semiconductor N-methyl-N-ethylmorpholinium-tetracyanoquinodimethane. **Physical Review B**, v. 21, p. 3437-3446.