

FASES DE BERRY EM MODELOS FERMIÔNICOS

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.
- 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

RESUMO

O modelo fermiônico com dois ou três sítios espaciais é utilizado para descrever as propriedades ópticas de sais orgânicos que possuem transferência de carga elétrica. Quando a constante de transferência que caracteriza o deslocamento do elétron para o sítio vizinho é muito pequena esse sistema pode ser aproximado, em primeira ordem, por dois modelos fermiônicos de um sítio espacial com férmions auto-interagentes independentes. Esta aproximação justifica o interesse de estudarmos o modelo fermiônico com apenas um sítio espacial, levando em conta a auto-interação dos férmions. As fases geométricas ou de Berry estão associadas a fases que os estados quânticos adquirem (além da fase devido à dinâmica) ao evoluir no tempo num regime adiabático. Nosso objetivo foi calcular as fases geométricas adquiridas pelos autoestados instantâneos da hamiltoniana de um elétron sob ação externa de um campo magnético dependente do tempo e de um campo elétrico clássico. Calculamos e obtivemos a evolução dinâmica do modelo fermiônico com um sítio espacial de dois níveis na presença de campos elétrico e magnético externos. Encontramos as autoenergias e autoestados desse modelo para condições gerais dos campos e escrevemos um vetor físico qualquer usando a base dos autoestados instantâneos da hamiltoniana calculando alguns valores médios de quantidades.

Palavras-chave: Teorema Adiabático. Fases Geométricas. Modelo Quântico.

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 é utilizado para descrever as propriedades ópticas de sais orgânicos que possuem transferência de carga elétrica (RICE, 1979; LIEBSCH; ISHIDA; MERINO, 2009). Esse fato torna importante o estudo de tais modelos fermiônicos.

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 (BERRY, 1984). O teorema adiabático mostra que se o sistema quântico de interesse está num autoestado de sua hamiltoniana no instante t , rotulado por um conjunto de números quânticos, permanecerá num autoestado dessa hamiltoniana em outro instante t' , que também é rotulado pelos mesmos números quânticos.

Nosso objetivo foi calcular as fases geométricas adquiridas pelos autoestados instantâneos da hamiltoniana de um elétron sob ação externa de um campo magnético dependente do tempo e de um campo elétrico clássico. Escrevemos, no regime adiabático, o operador densidade do sistema, responsável pela obtenção de valores médios de quantidade físicas relevantes.

MATERIAL E MÉTODOS

Para calcular as autoenergias, seus respectivos autoestados e, posteriormente, as fases geométricas, inicialmente, escreveremos a representação matricial da hamiltoniana que descreve nosso sistema quântico. Para isso, usamos a base completa dos autoestados da hamiltoniana eletrônica.

$$\mathbf{H}_e |i\rangle = \varepsilon_i |i\rangle, \quad i=1,2 \quad (1)$$

onde $|1\rangle \equiv \mathbf{a}_\uparrow^\dagger |0\rangle$, representa uma partícula com *spin up*, $|2\rangle \equiv \mathbf{a}_\downarrow^\dagger |0\rangle$ representa uma partícula com *spin down* e $|0\rangle$ representa o estado de vácuo do sistema. Com essa base, escrevemos a representação matricial da hamiltoniana e calculamos as energias $E_i^{(1)}(t)$ desse sistema e seus respectivos autoestados $|u_i^{(1)}; t\rangle$, com $i = 1,2$.

Com esses autoestados, que formam uma base completa de estados ortonormalizados para esse sistema de dois níveis, podemos decompor qualquer vetor neste sub-espço, assim temos que:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^2 c_j^{(1)}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int dt' E_j^{(1)}(t')} |u_j^{(1)}; t\rangle \quad (2)$$

Como a hamiltoniana varia no tempo, a projeção do estado $|\psi(t)\rangle$ nos autoestados da hamiltoniana depende do tempo, e essa dependência não se reduz a fase associada à energia. Em princípio, os coeficientes $c_j^{(1)}(t)$ 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:

$$H(t)|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle. \quad (3)$$

O operador densidade do sistema quântico em qualquer instante t é definido como:

$$F(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|, \quad (4)$$

Conhecido $F(t)$ exatamente em qualquer instante de tempo t , temos toda a informação que pode ser obtida sobre o sistema quântico. Em particular, os valores médios dos observáveis de uma partícula do sistema são obtidos a partir do conhecimento da matriz densidade de uma partícula $\Lambda(t)$,

$$\Lambda_{ij}(t) = Tr[a_j^\dagger a_i^\dagger F(t)]$$

$$\Lambda_{ij}(t) = \langle\psi(t)| a_j^\dagger a_i^\dagger |\psi(t)\rangle, \quad i, j = 1, 2 \quad (5)$$

Obtendo essas expressões de $c_j^{(1)}(t)$, e de $F(t)$ e de $\Lambda_{ij}(t)$, calcularemos algumas quantidades físicas associadas à operadores de 1-corpo e veremos o comportamento dessas quantidades devido a dinâmica do acoplamento do sistema quântico com o campo elétrico clássico $\vec{E}_{clas}(t)$ e com o campo magnético externo $\vec{B}(t)$.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para que se calculassem as energias e os respectivos autoestados deste modelo fermiônico, em que o elétron interage com um campo elétrico externo clássico e seu spin interage com um campo magnético externo dependente do tempo, escolhemos aplicar os estados $|1\rangle \equiv \mathbf{a}_\uparrow^\dagger |0\rangle$ e $|2\rangle \equiv \mathbf{a}_\downarrow^\dagger |0\rangle$ à hamiltoniana, obtendo-se a representação matricial da hamiltoniana:

$$H_T = \begin{vmatrix} \epsilon_1 + \lambda B_z(t) & -e\vec{E}_{clas} \cdot \vec{d}_{12} + \lambda(B_x(t) - iB_y(t)) \\ -e\vec{E}_{clas} \cdot \vec{d}_{21} + \lambda(B_x(t) + iB_y(t)) & \epsilon_2 - \lambda B_z(t) \end{vmatrix} \quad (6)$$

Resolvendo a equação de autovalores, caímos numa equação de segundo grau para o autovalor \mathcal{E} que é facilmente resolvida por Báskara, dando como resultados os autovalores:

$$\mathcal{E} \pm = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \pm \frac{\Delta}{2} \quad (7)$$

$$\Delta \equiv \left\{ (\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 + 4\lambda^2 B^2(t) + 4e^2 [\vec{E}_{clas} \cdot \vec{d}_{12}]^2 + 4\lambda [B_z(t)(\epsilon_1 - \epsilon_2) - 2B_x(t)Re[-e\vec{E}_{clas} \cdot \vec{d}_{12}] + 2B_y(t)Im[-e\vec{E}_{clas} \cdot \vec{d}_{12}]] \right\}^{1/2} \quad (8)$$

Tendo obtido os autovalores da hamiltoniana, encontramos os respectivos autoestados.

$$|u_1; t\rangle = \sqrt{\frac{\Delta + 2\lambda B_z(t) - (\epsilon_2 - \epsilon_1)}{2\Delta}} |\uparrow\rangle + 2 \frac{\lambda(B_x(t) - iB_y(t)) - e\vec{E}_{clas} \cdot \vec{d}_{21}}{\sqrt{2\Delta[\Delta + 2\lambda B_z(t) - (\epsilon_2 - \epsilon_1)]}} |\downarrow\rangle \quad (10)$$

$$|u_2; t\rangle = \sqrt{\frac{\Delta - 2\lambda B_z(t) + (\epsilon_2 - \epsilon_1)}{2\Delta}} |\uparrow\rangle - 2 \frac{\lambda(B_x(t) - iB_y(t)) - e\vec{E}_{clas} \cdot \vec{d}_{21}}{\sqrt{2\Delta[\Delta - 2\lambda B_z(t) + (\epsilon_2 - \epsilon_1)]}} |\downarrow\rangle \quad (11)$$

Com as expressões algébricas dos autoestados da hamiltoniana, é possível calcular suas fases geométricas adquiridas no regime adiabático. Nesse momento, impomos condições para os campos. Assumimos que o campo magnético tem norma constante e precessiona em torno de uma direção fixa no espaço com velocidade angular constante e que o campo elétrico tem a mesma frequência do campo magnético e também possui amplitude constante. Verificamos que os autoestados adquirem fases geométricas distintas,

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \frac{-2\omega(\rho + \lambda B \sin \theta)^2 T}{\Delta[\Delta + 2\lambda B \cos \theta + (\epsilon_2 - \epsilon_1)]} \\ \gamma_2 &= \frac{2\omega(\rho + \lambda B \sin \theta)^2 T}{\Delta[\Delta - 2\lambda B \cos \theta + (\epsilon_2 - \epsilon_1)]} \end{aligned} \quad (12)$$

Assim, o operador densidade do sistema quântico em qualquer instante t fica definido como:

$$\begin{aligned} \langle u_1; t | \mathcal{F} | u_1; t \rangle &= |C_1|^2 \\ \langle u_1; t | \mathcal{F} | u_2; t \rangle &= C_2(0)C_1(0)^* e^{+i\left\{ \left[\frac{t2\omega(\rho + \lambda B \sin \theta)^2}{\Delta[\Delta - 2\lambda B \cos \theta + (\epsilon_2 - \epsilon_1)]} - \frac{E_2 t}{\hbar} \right] + \left[\frac{t2\omega(\rho + \lambda B \sin \theta)^2}{\Delta[\Delta + 2\lambda B \cos \theta + (\epsilon_2 - \epsilon_1)]} + \frac{E_1 t}{\hbar} \right] \right\}} \\ \langle u_2; t | \mathcal{F} | u_1; t \rangle &= C_1(0)C_2(0)^* e^{-i\left\{ \left[\frac{t2\omega(\rho + \lambda B \sin \theta)^2}{\Delta[\Delta + 2\lambda B \cos \theta + (\epsilon_2 - \epsilon_1)]} + \frac{E_1 t}{\hbar} \right] + \left[\frac{t2\omega(\rho + \lambda B \sin \theta)^2}{\Delta[\Delta - 2\lambda B \cos \theta + (\epsilon_2 - \epsilon_1)]} - \frac{E_2 t}{\hbar} \right] \right\}} \\ \langle u_2; t | \mathcal{F} | u_2; t \rangle &= |C_2|^2 \end{aligned} \quad (13)$$

Conhecido $\mathcal{F}(t)$ exatamente em qualquer instante de tempo t , temos toda a informação que pode ser obtida sobre o sistema quântico. Em particular, os valores médios dos observáveis de uma partícula do sistema são obtidos a partir do conhecimento da matriz densidade da partícula $\Lambda(t)$.

CONCLUSÕES

Calculamos e obtivemos a evolução dinâmica do modelo fermiônico com um sítio espacial de dois níveis na presença de campos elétrico e magnético externos. Encontramos as autoenergias e autoestados desse modelo para condições gerais dos campos. Para a obtenção das fases geométricas adquiridas pelos autoestados instantâneos, no regime adiabático, assumimos nos cálculos que o campo magnético possui norma constante e precessiona com velocidade angular constante em torno de uma direção fixa no espaço. Adotamos também que o campo elétrico possui amplitude constante e tem a mesma frequência do campo magnético. Verificamos que os dois autoestados adquirem fases geométricas distintas.

Escrevemos um vetor físico qualquer usando a base dos autoestados instantâneos da hamiltoniana e montamos o operador densidade do sistema no regime adiabático.

AGRADECIMENTOS

Rafael Borges agradece a UEMS pelo suporte financeiro, através de bolsa de IC, para a realização desse trabalho. Agradece também aos amigos Flávio e Wilson pelas inúmeras e produtivas discussões a respeito do projeto. E agradece principalmente os elogios, apoio e incentivo dado por sua família.

REFERÊNCIAS

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

JOHNSON, R.A.; DIENES, G.J. Kinetics of two-state chemisorption: Hydrogen on niobium. *Physical Review B*, College Park-Maryland, v. 21, p. 3437-3446, abr. 1980.

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

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