La fase de Berry. Evolució temporal cíclica de sistemes quàntics oberts

Josep Graells*i Carme Martín†
Departament de Física Aplicada. Universitat de Barcelona

Introducció

Si bé el formalisme matemàtic de la teoria quàntica és plenament acceptat per la comunitat científica de manera quasi tan natural com són acceptats les observacions i resultats experimentals als quals condueix, la seva interpertració és, i ha estat des dels seus inicis, objecte de múltiples controvèrsies. Així, mentre que el més habitual és que la descripció d'un procés físic doni lloc a un desenvolupament matemàtic que s'adeqüi a tal descripció, en el cas de la teoria quàntica, el formalisme matemàtic ha conduït a la predicció de processos físics, moltes vegades obertament contraris als dictats de la concepció clàssica del món físic, i que encara avui són objecte d'interpretacions contraposades en la seva vessant epistemològica. Tanmateix, des del punt de vista dels resultats, la unanimitat en l'acceptació de la teoria quàntica és total, de manera que en aquest sentit es pot equiparar a d'altres teories clàssiques com l'electromagnetisme maxwel·lià, que poques sorpreses esperem que ens depari. Per aquesta raó, el descobriment fet per Berry el 1984 de la fase que porta el seu nom és realment sorprenent. Durant prop de seixanta anys es va pensar que la fase de la funció d'ona era irrellevant, ja que en els processos directament mesurables només intervenen els valors esperats dels operadors amb la funció d'ona. En conseqüència, no es va donar major importància a una part de la fase, anomenada per alguns fase "geomètrica", que ja V. Fock va demostrar el 1928 que no afectava l'evolució de sistemes oberts, això és, en interacció amb el seu entorn, en processos no cíclics. És més, una simple transformació de la fase podia anul·lar la fase geomètrica en processos no cíclics. Ningú, però, no es va preguntar què podia passar en un procés cíclic, això és, en un procés en el qual els paràmetres dependents del temps tornen, després d'un interval, als seus valors inicials. Tanmateix, llavors ja es coneixia, el fenomen essencialment geomètric de la no-holonomicitat del transport paral·lel. Per exemple, considerem un pèndol ideal, el suport del qual és transportat sense moviments bruscos i molt lentament respecte al període d'oscil·lació, el pèndol efectua moltes oscil·lacions abans que el seu suport s'hagi mogut apreciablement. Per fixar les idees suposem que és transportat des del Pol Nord al llarg del meridià que passa per Barcelona, fins a arribar a l'Equador. Quan arriba a l'Equador continuarà oscil·lant en la direcció nord-sud inicial (menyspreem el moviment de rotació de la Terra). Seguidament és transportat al llarg de l'Equador fins a arribar a trobar el meridià que passa per l'Havana. En aquest segon tram del transport, el pla d'oscil·lació del pèndol continuarà sent perpendicular a l'Equador, com ho era a l'inici del segon tram. Finalment, i seguint el meridià que passa per l'Havana, se'l retorna al Pol Nord. És evident que si el recorregut pels tres trams s'ha efectuat molt lentament i suau, la direcció d'oscil·lació del pèndol a l'arribada diferirà de la direcció d'oscil·lació a la partença segons l'angle que formen els dos meridians. En general, quan una magnitud depèn de paràmetres, de manera que quan aquests varien la magnitud no experimenta cap canvi local, i tanmateix quan els paràmetres tornen als seus valors inicials el valor de la magnitud no coincideix amb l'inicial, es diu que la magnitud ha experimentat un transport paral·lel no holonòmic. El transport no holonòmic implica l'existència del que s'anomena una connexió o potencial de galga. Per raons de senzillesa en tot el context de l'article no es farà un ús explícit de les teories de galga, si bé el lector coneixedor de les esmentades teories no tindrà dificultats a identificar matemàticament i conceptual l'estructura, formalisme i magnituds dins d'aquest entorn més general.

Paral·lelament, i a partir de 1927, s'anava desenvolupant l'aproximació de Born-Oppenheimer per a l'estudi de les molècules. Les idees bàsiques reposaven en un mètode científic tan tradicional com és el de reduir un sistema complex a subsistemes més simples. Així, si les variables de què depèn el sistema es poden dividir de forma natural en dues classes (les que varien ràpidament amb el temps, i les que varien lentament amb el temps), la reducció del sistema complex a subsistemes és sen-

*__Josep Graells i Casanellas__ (Cervera, 1946) és pèrit Industrial Elèctric, per l'Escola d'Enginyeria Tècnica Industrial de Terrassa (1967) i doctor en Física per la Universitat de Barcelona (1978), i actualment treballa a FECSA en la direcció de Recursos Humans i Organització.

†__Carme Martín Torres__ (Barcelona, 1950) és doctora en Física per la Universitat de Barcelona (1981) i és professora del col·legi La Salle Gràcia.

zilla. En l'aproximació de Born-Oppenheimer, la part lentament variable amb el temps correspondria a les variables que descriuen la dinàmica dels nuclis, i la part que varia ràpidament amb el temps correspondria a les variables que descriuen la dinàmica electrònica. En una primera aproximació es resol el problema considerant les variables que varien lentament amb el temps com a paràmetres fixos, i un cop coneguda la dinàmica de les variables ràpides es resol la dinàmica de les lentes. L'estat quàntic del sistema serà llavors el producte directe dels estats dels dos subsistemes. Tanmateix, els dos moviments no són independents. La dinàmica de les variables que varien ràpidament afecta la dinàmica de les que varien lentament. Mead i Truhlar el 1979 van demostrar que si les variables nuclears no es consideren com a paràmetres fixos, quan experimenten un cicle indueixen en les variables electròniques una fase no trivial, de la qual deriva la connexió o potencial de galga d'una força efectiva que modifica la dinàmica dels nuclis. En conseqüència, ja no es pot considerar l'estat del sistema com a producte directe dels estats dels dos subsistemes. I el fet que l'expressió de la variació de la fase geomètrica calculada per a un cicle de les variables nuclears admetés una interpretació com a connexió o potencial de galga, indicava clarament que no podia ser eliminada per una simple transformació de fase, ja que posava de manifest el fenomen del transport paral·lel no holonòmic dels estats quàntics. Tanmateix, va ser M. V. Berry qui el 1984 va trobar, de manera independent, la mateixa expressió per a la variació de la fase geomètrica en un procés cíclic, en un context molt més general. Berry va partir de l'estudi de sistemes físics oberts que depenen d'un entorn que varia molt lentament en el temps, dependència que es pot posar de manifest mitjançant hamiltonians que depenen de paràmetres q^a que varien lentament respecte el temps: $H(q^a(t))$. Acceptant l'aproximació adiabàtica, segons la qual quan el hamiltonià evoluciona lentament amb el temps l'enèsim estat propi del hamiltonià en el temps t_0 evoluciona d'acord amb l'equació de Schrödinger, de manera que per a qualsevol altre temps t_f continua sent el mateix enèsim estat propi del hamiltonià evolucionat en el temps t_f (sense aquesta aproximació el nou estat seria una superposició de diversos estats propis), Berry va demostrar que en un procés cíclic, això és, tal que $q^a(t_0) = q^a(t_f)$, la variació de la fase geomètrica adquiria un valor determinat, que no es podia eliminar mitjançant les transformacions de fase. L'expressió que va trobar coincidia amb l'obtinguda per Mead i Truhlar en el cas particular derivat de l'aproximació molecular de Born-Oppenheimer. Generalitzava, per tant, la interpretació d'aquesta fase com a conseqüència d'una connexió o potencial de galga en el cas de qualsevol sistema quàntic sotmès a la influència d'un entorn que varia lentament (adiabàticament) amb el temps.

Un cop més havia quedat demostrada la capacitat que té el món físic d'ensenyar-nos que mai s'ha d'acceptar, sense un agut sentit crític, les conclusions, en aparença més evidents, derivades de qualsevol teoria. En efecte, havia quedat demostrat que, en determinades condicions, almenys una part de la fase de la funció d'ona *no* era en cap sentit irrellevant.

En aquest article s'intentarà demostrar d'una manera com més elemental millor, tot el que s'acaba d'anticipar, llevat de l'aplicació a l'aproximació de Born-Oppenheimer, que es deixa per al lector. En aquest sentit, recomanem la consulta de la monografia *Geometric Phases in Physics* (Shapere i Wilczek, 1989), on es troben tots els articles originals i l'àmplia aplicació que en quasi tots els dominis de la física, tant teòrics com experimentals, té aquesta temàtica. Per exemple, s'hi detallen els dispositius experimentals basats en fibres òptiques, ressonància magnètica nuclear, etc., que permeten mesurar la fase de Berry.

Hamiltonians dependents de paràmetres. Fase dinàmica

Considerem un sistema quàntic obert, els observables del qual, i en particular el seu hamiltonià, depenen de paràmetres $\overline{q} = (q^a) = \{q^1, q^2, \cdots, q^f\}$ que descriuen l'entorn en el qual el sistema quàntic està immers. Els paràmetres $\{q^a\}$ poden interpretar-se com a coordenades d'un espai de configuració semblant als de la mecànica analítica o als de la termodinàmica.

El Hamiltonià $H[(q^a)]$ i els seus estats propis $|n, q^a\rangle$ dependran en general de (q^a):

$$H[(q^a)]|n; q^a\rangle = E_n(q^a)|n; q^a\rangle \,. \tag{1}$$

Per simplificar la notació i el tractament matemàtic, se suposarà que l'espectre energètic és discret i que no hi ha degeneració d'estats, per tant, es verificaran les igualtats següents:

$$\begin{aligned} \langle n; q^a | m; q^a\rangle &= \delta_{mn} \qquad \text{ortonormalitat} \\ I &= \sum_n |n; q^a\rangle\langle n; q^a| \qquad \text{completesa,} \end{aligned} \tag{2}$$

sent δ_{mn} la delta de Kronecker, és a dir, $\delta_{mn} = 1$ si $m = n$, i $\delta_{mn} = 0$ si $m \neq n$.

Qualsevol procés que tingui lloc en l'entorn, amb un paràmetre temporal $C : t \to \overline{q}(t)$, indueix en el sistema quàntic una evolució temporal regida per un hamiltonià dependent del temps $H(t) \equiv H(\overline{q}(t))$, amb la resolució espectral següent:

$$H(t) = \sum_n E_n(\overline{q}(t))|n; \overline{q}(t)\rangle\langle n; \overline{q}(t)| \,.$$

Se suposarà que els observables són funcions univaluades en tot l'espai dels paràmetres $\{q^a\}$ de l'entorn. La univaluació dels observables significa que si al llarg d'un procés es passa pel mateix valor de $\{q^a\}$ més d'una vegada, llavors els observables són els mateixos en cada coincidència. En particular si el procés és tancat, és a dir, si $\overline{q}(t)$ travessa una trajectòria tancada i retorna al cap d'un període T al punt de partença:

$$C : t \to \overline{q}(t) \quad \text{amb} \quad \overline{q}(0) = \overline{q}(T)\,,$$

llavors es verificarà:

$$\begin{aligned} H[\overline{q}(T)] &= H[\overline{q}(0)] \\ E_n[\overline{q}(T)] &= E_n[\overline{q}(0)]\,. \end{aligned} \tag{3}$$

Els vectors base $|n;\overline{q}(t)\rangle$ estan definits per (1) i (2) llevat d'un factor de fase, i encara que no és necessari, se suposarà també que al llarg d'un procés tancat es poden escollir de forma univaluada, és a dir:

$$|n;\overline{q}(T)\rangle = |n;\overline{q}(0)\rangle\,.$$

L'evolució temporal de l'estat $|\Psi(t)\rangle$ del sistema obert, i per tant no conservatiu, ve regida per l'equació de Schrödinger amb un hamiltonià dependent del temps $H(t) = H[\overline{q}(t)]$:

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = H(t)|\Psi(t)\rangle\,. \tag{4}$$

Atès que els $|n;\overline{q}(t)\rangle$ constitueixen una base, l'estat $|\Psi(t)\rangle$ es pot desenvolupar en funció d'aquesta:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t)|n;\overline{q}(t)\rangle\,. \tag{5}$$

Seguidament s'estudiarà un cas particular, la importància del qual resideix en el fet que ajudarà a resoldre el cas general, i a la vegada servirà per introduir l'anomenada *fase dinàmica*. Consisteix a suposar que els estats propis de $H(t)$ no depenen dels paràmetres de l'entorn i, per tant, no depenen del temps; la dependència temporal sols es manifestarà a través dels valors propis de $H(t)$, és a dir, de l'espectre energètic $E_n(t) = E_n(\overline{q}(t))$:

$$H(t)|n\rangle = E_n(t)|n\rangle, \quad |\Psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t)|n\rangle\,. \tag{6}$$

En substituir a (6) l'equació de Schrödinger (4), s'obté una equació pels coeficients $C_n(t)$ que desenvolupen $|\Psi(t)\rangle$:

$$\sum_n i\hbar\frac{dC_n(t)}{dt}|n\rangle = \sum_n E_n(t)C_n(t)|n\rangle\,. \tag{7}$$

Quan es projecta l'equació (7) sobre l'estat $|m\rangle$ i s'aplica la condició d'ortonormalització dels vectors base $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$, s'obté una equació diferencial ordinària per a $C_m(t)$:

$$i\hbar\frac{dC_m(t)}{dt} = E_m(t)C_m(t)\,,$$

la integració de la qual és immediata:

$$C_m(t) = C_m(0)e^{-i/\hbar\int_0^t E_m(t')dt'}\,.$$

Substituint aquest resultat a (6) s'obté:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_m C_m(0)e^{-i/\hbar\int_0^t E_m(t')dt'}|m\rangle$$

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_m C_m(0)|m\rangle\,.$$

Si en $t = 0$ el sistema es prepara en un estat propi de $H(t)$, per exemple $|\Psi(0)\rangle = |n\rangle$, llavors $C_m(0) = \delta_{mn}$ i, per tant,

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i/\hbar\int_0^t E_m(t')dt'}|n\rangle\,.$$

$|\Psi(t)\rangle$ només difereix de $|n\rangle$ en el factor de fase

$$e^{i\theta_n(t)} \equiv e^{-i/\hbar\int_0^t E_m(t')dt'}$$

on el terme

$$\theta_n(t) \equiv -i/\hbar\int_0^t E_n(t')dt' \tag{8}$$

és conegut com la *fase dinàmica*, i generalitza el factor "estàndard" $-E_n t/\hbar$ en el cas en què E_n és una funció del temps. Per al cas particular que s'acaba d'analitzar, els estats propis del hamiltonià són estats estacionaris, és a dir, no hi ha transicions entre els diferents estats ja que evolucionen temporalment mitjançant el factor de fase dinàmica $e^{i\theta_n(t)}$.

La fase de Berry

Retornem ara al cas general en el què l'estat $|\Psi(t)\rangle$ del sistema s'expressa segons el desenvolupament indicat l'equació (5) on els estats propis també depenen dels paràmetres:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t)|n;\overline{q}(t)\rangle\,.$$

Esdevé d'utilitat explicitar del coeficient $C_n(t)$ la fase dinàmica $\theta_n(t)$ introduïda en l'apartat anterior, el qual condueix a definir un nou coeficient $a_n(t)$ a través de la igualtat

$$C_n(t) = a_n(t)e^{-i\theta_n(t)} \equiv a_n(t)e^{-i/\hbar\int_0^t E_n(t')dt'}\,.$$

En funció dels $a_n(t)$, $|\Psi(t)\rangle$ s'expressa de la manera equivalent:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t)e^{-i\theta_n(t)}|n;\overline{q}(t)\rangle\,, \tag{9}$$

sent $|\Psi(0)\rangle = \sum_n a_n(0)|n;\overline{q}(0)\rangle$. Si en $t = 0$ el sistema es prepara en l'estat propi $|l;\overline{q}(0)\rangle$ de $H(0)$ tots els $a_n(0)$

són zero llevat del $a_l(0)$, que val 1, és a dir, que $a_n(0) = \delta_{nl}$.

En substituir el desenvolupament de $|\Psi(t)\rangle$ indicat a l'equació (9), dins l'equació de Schrödinger (4), i tenint en compte que $de^{i\theta_n(t)}/dt = -i/\hbar E_n(t)e^{i\theta_n(t)}$, s'obté fàcilment:

$$i\hbar \sum_n \left[e^{i\theta_n(t)} \left(\frac{da_n(t)}{dt} |n;\overline{q}(t)\rangle + a_n(t)\frac{d}{dt}|n;\overline{q}(t)\rangle \right)\right] = 0.$$

Si ara es projecta aquesta equació sobre l'estat $\langle l;\overline{q}(t)|$ i s'aplica la condició d'ortonormalització (2), immediatament es dedueix l'equació següent:

$$\frac{da_l(t)}{dt} = \sum_n a_n(t) e^{i[\theta_n(t)-\theta_l(t)]}\langle l;\overline{q}(t)|\frac{d}{dt}|n;\overline{q}(t)\rangle . \qquad (10)$$

Fins aquí tots els resultats són exactes, en el sentit que no s'ha fet cap aproximació. A partir d'ara se suposarà aplicable l'aproximació adiabàtica. En mecànica quàntica el contingut essencial de l'aproximació adiabàtica pot formular-se sota la forma d'un teorema d'expressió senzilla però de demostració difícil. S'ha de suposar que el hamiltonià $H(t) = H[\overline{q}(t)]$ canvia molt gradualment, és a dir, de manera molt lenta des de $H(t = 0)$ fins a $H(t = T)$. Així, si T és la durada o període del cicle que efectuen els paràmetres $\overline{q}(t)$ de l'entorn i T_Q el temps o període característic del sistema quàntic (per exemple la separació temporal equivalent entre els nivells energètics), s'ha de verificar que $T \gg T_Q$. Llavors, si el sistema quàntic es prepara inicialment en el l-èsim estat propi $|l;\overline{q}(0)\rangle$ de $H(\overline{q}(0))$, serà transportat, sota l'equació de Schrödinger en el corresponent estat l-èsim propi de $H[\overline{q}(T)]$, llevat d'un possible factor fàsic.

Aquesta formulació senzilla pressuposa que l'espectre del sistema quàntic és discret i no degenerat durant la transició, des de $t = 0$ a $t = T$. Aquestes restriccions poden relaxar-se a través d'un procediment adequat per "seguir" els vectors propis.

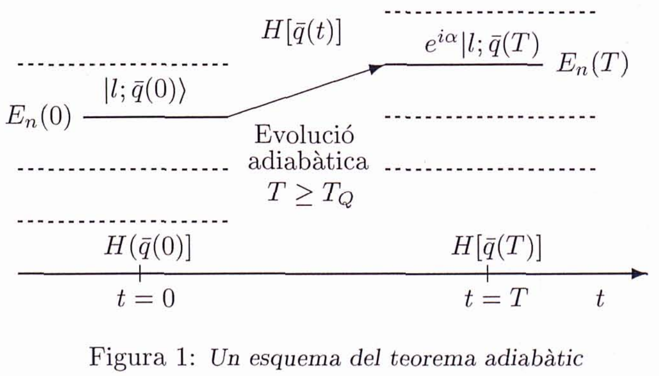

Figura 1: *Un esquema del teorema adiabàtic*

L'aplicació del teorema adiabàtic permet simplificar l'equació (10), atès que sols el terme l-èsim del segon membre dóna una contribució significativa:

$$\frac{da_l(t)}{dt} \doteq -a_l(t)\langle l;\overline{q}(t)|\frac{d}{dt}|l;\overline{q}(t)\rangle . \qquad (11)$$

Amb el símbol $\doteq$ es vol explicitar que no es tracta d'una igualtat sinó del resultat d'aplicar l'aproximació adiabàtica, on es negligeixen els termes $n \neq l$. Atès que $a_l(0) = 1$, ja que el sistema es prepara en $t = 0$ en l'estat $|l;\overline{q}(0)\rangle$, la integració de l'equació (11) és:

$$a_l(t) \doteq e^{i\int_0^t \langle l;\overline{q}(t)|d/dt|l;\overline{q}(t)\rangle dt} \equiv e^{i\gamma_l(t)} , \qquad (12)$$

sent

$$\gamma_l(t) = \int_0^t dt\langle l;\overline{q}(t)|i\frac{d}{dt}|l;\overline{q}(t)\rangle . \qquad (13)$$

Atès que $i(d/dt)$ és un operador hermític, $\gamma_l(t)$ és un nombre real. Observem que està definit llevat d'un múltiple de 2π. Substituint els darrers resultats a l'equació (9), s'obtindrà l'evolució de l'estat $|l;\overline{q}(0)\rangle$ en l'aproximació adiabàtica:

$$|\Psi(t)\rangle \doteq e^{i\theta_l(t)}e^{i\gamma_l(t)}|l;\overline{q}(t)\rangle . \qquad (14)$$

Si el procés que té lloc en l'entorn del sistema quàntic és tancat, és a dir, si el hamiltonià retorna a la forma original després d'un temps T

$$C : t \to \overline{q}(t) \quad \text{amb} \quad \overline{q}(T) = \overline{q}(0) \quad \text{i} \quad H(0) = H(T) ,$$

llavors

$$|\Psi(T)\rangle \doteq e^{i\theta_l(T)}e^{i\gamma_l(T)}|l;\overline{q}(T) = \overline{q}(0)\rangle . \qquad (15)$$

En aquest cas la fase $\gamma_l(T)$ es coneix com a *fase de Berry*, ja que va ser M. V. Berry qui la va descobrir el 1984, bé que C. Mead *et al.* la van introduir dins el context de l'aproximació de Born-Oppenheimer el 1979.

La fase de Berry $\gamma_l(T)$ es pot expressar de les maneres equivalents següents:

$$\begin{aligned} \gamma_l(T) &= i\int_0^T dt'\langle l;\overline{q}(t')|\frac{d}{dt'}|l;\overline{q}(t')\rangle \\ &= i\oint_C \langle l;\overline{q}|d|l;\overline{q}\rangle \equiv \oint_C A_{(l)} , \end{aligned}$$

sent $A_{(l)} \equiv \langle l;\overline{q}|d|l;\overline{q}\rangle$ una 1-forma diferencial definida en l'espai dels paràmetres externs. Evidentment d és la diferencial total respecte $\overline{q} = \{q^a\}$ aplicada al ket $|l,\overline{q}\rangle$, és a dir:

$$\begin{aligned} d|l;\overline{q}\rangle &= \frac{\partial}{\partial q^1}|l;\overline{q}\rangle dq^1 + \frac{\partial}{\partial q^2}|l;\overline{q}\rangle dq^2 + \cdots + \frac{\partial}{\partial q^f}|l;\overline{q}\rangle dq^f \\ &= \nabla|l;\overline{q}\rangle \cdot d\overline{q} \ ,. \end{aligned}$$

Això permet expressar $A_{(l)} = \overline{A}_{(l)} \cdot d\overline{q}$ d'una forma paral·lela a la de l'anàlisi vectorial

$$A_{(l)} = \langle l;\overline{q}|\nabla_{\overline{q}}|l;\overline{q}\rangle \cdot d\overline{q} ,$$

i de manera anàloga la fase de Berry

$$\gamma_l(T) = i\oint_C \langle l;\overline{q}|\nabla_{\overline{q}}|l;\overline{q}\rangle \cdot d\overline{q} . \qquad (16)$$

Propietats de la fase de Berry

1. Com s'ha anticipat en l'apartat anterior, $E^{i\gamma_n(t)}$ és un factor fàsic, és a dir, de mòdul unitat, ja que γ_n és un nombre real.

Aquest resultat també implica que, si les funcions pròpies del hamiltonià $\langle \overline{x}|n;\overline{q}\rangle = \Psi_n(\overline{x};\overline{q})$ admeten una representació real, llavors la fase $\gamma_n(t)$ és nul·la. En efecte, si $\Psi_n(\overline{x};\overline{q})$ és una funció real, també ho és $\nabla_{\overline{q}}\Psi_n(\overline{x};\overline{q})$; per tant, $\langle \Psi_n|\nabla_{\overline{q}}\Psi_n\rangle$ és un nombre real i a la vegada imaginari pur (com s'ha demostrat abans), i, per tant, ha de ser zero.

2. S'acaba de demostrar que la fase $\gamma_n(t)$ és nul·la quan les funcions pròpies del hamiltonià són reals. Aquest fet, i tenint en compte que els vectors base $|n;\overline{q}\rangle$ resten definits llevat d'un factor de fase, condueix a plantejar-se la pregunta de si seria possible cancel·lar el factor $e^{i\gamma_n}$ mitjançant una transformació de fase adequada dels vectors $|n;\overline{q}\rangle$. S'ha de recordar que els factors fàsics s'han considerat irrellevants des dels inicis de la mecànica quàntica, fins que Mead (1979) i Berry (1984) es van adonar de la seva rellevància física. Per tant, han romàs relegats durant quasi mig segle. La següent transformació de fase dels vectors base

$$|n;\overline{q}\rangle \to |n;\overline{q}\rangle' = e^{i\chi(\overline{q})}|n;\overline{q}\rangle$$

definida per una funció arbitrària $\chi_n(\overline{q})$ (mòdul 2π), indueix la següent transformació en $\gamma_n(t)$:

$$\gamma_n(t) \to \gamma_n'(t) = i\int_{\overline{q}(0)}^{\overline{q}(t)} \langle n|'\nabla_{\overline{q}}|n\rangle' \cdot d\overline{q} = \int_{\overline{q}(0)}^{\overline{q}(t)} \overline{A}_{(n)}' \cdot d\overline{q}.$$

El càlcul de la transformació de la 1-forma integrant condueix al resultat següent:

$$\overline{A}_{(n)} \to \overline{A}_{(n)}' = i\langle n;\overline{q}|e^{-i\chi_n(\overline{q}}\nabla_{\overline{q}}(e^{i\chi_n(\overline{q}}|n;\overline{q}\rangle) =$$

$$= i\langle n;\overline{q}|\nabla_{\overline{q}}|n;\overline{q}\rangle - \nabla_{\overline{q}}\chi_n(\overline{q}) = \overline{A}_{(n)} - \nabla_{\overline{q}}\chi_n(\overline{q})\,.$$

Substituint-lo en γ_n' resulta:

$$\gamma_n(t) \to \gamma_n'(t) = \gamma_n(t) - \chi_n(\overline{q}(t)) - \chi_n(\overline{q}(0))\,. \qquad (17)$$

D'altra banda, si el càlcul de $|\Psi(t)\rangle$, equació (14), s'hagués fet emprant els vectors base $|n;\overline{q}\rangle'$, trivialment s'hauria obtingut

$$|\Psi(t)\rangle \doteq e^{i\theta_n(t)}e^{i\gamma_n'(t)}|n;\overline{q}(t)\rangle'$$

$$= e^{i\theta_n(t)}e^{i\gamma_n'(t)}e^{i\chi_n(\overline{q}(t))}|n;\overline{q}(t)\rangle\,.$$

Atès que $\chi_n(\overline{q})$ és una funció arbitriària, es pot escollir de forma que

$$e^{i[\gamma_n'(t)+\chi_n(\overline{q}(t))]} = 1\,,$$

llavors, en t sols resta la fase dinàmica

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\theta_n(t)}|n;\overline{q}(t)\rangle\,.$$

Si després d'un període T els paràmetres $\overline{q}(t)$ retornen al seu valor original $\overline{q}(0) = \overline{q}(T)$, és a dir, si s'efectua un cicle tancat en l'espai de l'entorn del sistema quàntic, llavors, de la univaluació de $e^{i\chi_n(\overline{q})}$ i de l'equació (17), resulta que no és possible cancel·lar la fase de Berry $\gamma_n(T)$ de l'equació (15) .

En efecte, la fase de Berry $\gamma_n(T)$ està definida per una integral de línia al llarg d'un contorn tancat:

$$\gamma_n(T) = \oint_C \overline{A}_{(n)} \cdot d\overline{q} = i\oint_C \langle n;\overline{q}|\nabla_{\overline{q}}|n;\overline{q}\rangle \cdot d\overline{q}$$

i, ja que $e^{i\chi_n(\overline{q})}$ és univaluada, es verificarà:

$$e^{i\chi_n(\overline{q}(T))} = e^{\chi_n(\overline{q}(0))} \Rightarrow \chi_n(\overline{q}(T)) = \chi_n(\overline{q}(0)) + 2\pi\cdot\text{enter}.$$

Per tant,

$$\gamma_n(T) \to \gamma_n'(T) = \gamma_n(T) - 2\pi\cdot\text{enter}\,.$$

En conseqüència, la fase de Berry $\gamma_n(T)$, que està definida mòdul 2π, és un invariant respecte a les transformacions de fase dels vectors base $|n;\overline{q}\rangle$ i, per tant, no pot ser eliminada, com ja s'havia anticipat abans.

Encara que la fase de Berry $\gamma_n(T)$ no pot ser cancel·lada per les transformacions de fase, sí que en alguns casos pot ser nul·la. Ja s'ha vist que quan les funcions pròpies del hamiltonià són reals, ho és. També és zero quan la 1-forma integrant $A_{(n)} = \overline{A}_{(n)} \cdot d\overline{q}$ és exacta (curvatura de l'espai fibrat nul·la) i són aplicables les condicions del lema de Poincaré en el domini definit pel cicle C.

La no-nul·litat de la fase de Berry és un exemple, dins del context de les teories de galga, de la no-holonomicitat del transport paral·lel dels estats quàntics. En aquest cas, es tracta d'una teoria de galga del grup de transformació $U(1)$, els elements del qual són els factors fàsics $e^{i\alpha}$. La curvatura de l'espai fibrat és la diferencial exterior de la 1-forma connexió $A_{(n)}$. La fase de Berry esdevé un invariant sota les transformacions de galga, ja que s'expressa com el flux de la curvatura:

$$\gamma(T) = \oint_{C=\partial(s)} \overline{A}_{(l)} \cdot d\overline{q} = \int_S dA_{(l)} \cdot dS\,.$$

3. El fet que la fase de Berry és invariant sota transformacions de fase, fa plausible que pugui detectar-se experimentalment. Això no deixa de ser sorprenent, perquè s'està habituat a pensar que la fase d'un ket $|\Psi(t)\rangle$ no és susceptible de mesura. Les magnituds físiques directament mesurables fan intervenir bilinials en els kets, el més senzill dels quals és $|\Psi|^2 = \langle\Psi|\Psi\rangle$, i per tant es cancel·len els factors de fase.

No obstant això $\gamma_n(T)$ sí que pot mesurar-se. Per exemple, si es prepara un feix de partícules, totes en l'estat $|\Psi_0\rangle$, i seguidament se subdivideix en dos feixos iguals, un dels quals es fa passar per una regió en la qual actua un potencial que varia amb el temps adiabàticament, mentre que l'altre feix es fa passar per una regió sense potencial, llavors, quan es recombinen ambdós feixos, el ket total té la forma:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2}|\Psi_0\rangle + \frac{1}{2}e^{i\Gamma}|\Psi_0\rangle\,,$$

sent $|\Psi_0\rangle$ el ket corresponent al feix directe i Γ la fase extra (en part dinàmica i en part de Berry), que adquireix el feix subjecte al potencial variable.

Per tant,

$$|\Psi|^2 = \langle\Psi_0|\Psi_0\rangle \cos^2\frac{\Gamma}{2}\,.$$

Així, observant els punts d'interferència constructiva i destructiva, és a dir, quan Γ és un múltiple parell o senar de π, Γ es pot mesurar fàcilment. A més a més, s'han ideat disposicions experimentals que permeten de separar els efectes associats a la fase dinàmica dels de la de Berry.

Fase geomètrica. L'efecte Aharanov-Bohm

El conegut efecte Aharanov-Bohm pot interpretar-se com un exemple de la fase de Berry. En aquest cas també es coneix com a fase geomètrica, perquè així se la defineix quan no cal recórrer a l'aproximació adiabàtica per estudiar el problema analíticament.

Recordem que l'efecte Aharanov-Bohm considera una partícula elèctricament carregada que es mou en una regió on el camp magnètic $\vec{B} = \mathrm{rot}\,\vec{A}$ és zero, però en la qual el potencial vector $\vec{A}$ és diferent de zero, i en la qual no hi ha cap transformació de galga que compensi el potencial vector $\vec{A}$.

La disposició estàndard considera un solenoide rectilini i pràcticament indefinit, de forma que dins del solenoide $\vec{B} \neq \vec{0}$ i fora $\vec{B} = \vec{0}$. Fàcilment s'infereix que fora del solenoide, $\vec{A}$ necessàriament ha de ser diferent de zero. En efecte, sols cal calcular el flux del camp magnètic, mitjançant la integració del potencial vector al llarg d'una trajectòria tancada que concateni per fora el solenoide, és a dir, en la regió en què $\vec{B} = \vec{0}$, per deduir que $\vec{A} \neq \vec{0}$ en aquesta regió:

$$0 \neq \Phi = \int_S \vec{B}\cdot d\vec{S} = \oint_{C=\partial(S)} \vec{A}\cdot d\vec{r}\,.$$

Si, a més a més, en la regió fora del solenoide la partícula està sotmesa a una energia potencial $V(r)$, que pot incloure contribucions electrostàtiques, la seva funció d'ona Ψ verifica l'equació de Schrödinger següent:

$$\left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - q\vec{A})^2 + V\right] = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\,. \tag{18}$$

La resolució de l'equació (18) es facilita en efectuar la següent transformació de la funció d'ona Ψ:

$$\Psi = e^{ig(\vec{r})}\Psi'\,, \tag{19}$$

on $g(\vec{r})$ ve correctament definida per la integral

$$g(\vec{r}) = \frac{q}{\hbar}\int_{\vec{R}}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}')\cdot d\vec{r}'$$

atès que, en verificar-se $\nabla\times\vec{A} = \vec{0}$, la integral és independent de la trajectòria que uneix el punt de referència $\vec{R}$ amb $\vec{r}$; sols cal tenir en compte la igualtat

$$(-i\hbar\nabla - q\vec{A})\Psi = -i\hbar e^{ig}\nabla\Psi'$$

per comprovar que Ψ' verifica l'equació de Schrödinger sense $\vec{A}(\vec{r})$, és a dir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi' + V\Psi' = i\hbar\frac{\partial\Psi'}{\partial t}\,.$$

Aharanov i Bohm van proposar el 1959 un experiment en el qual un feix d'electrons se subdivideix en dos feixos que es fan passar per fora d'un llarg solenoide abans de recombinar-se. Els feixos es mantenen allunyats del solenoide i, per tant, sols travessen la regió en què $\vec{B} = \vec{0}$, però com ja s'ha recalcat $\vec{A} \neq \vec{0}$. Si ara se suposa que V és el mateix en els dos costats pels quals passen ambdós feixos d'electrons, aquests, quan es recombinin, tindran una diferència de fase:

$$\frac{q}{\hbar}\oint_C \vec{A}\cdot d\vec{r} = \frac{q\Phi}{\hbar}\,,$$

sent Φ el flux del camp magnètic del solenoide a través d'una superfície que tingui per contorn la trajectòria tancada definida pels dos feixos d'electrons. Aquesta diferència de fase condueix a fenòmens d'interferència, que ja s'havien detectat experimentalment el 1960 per R. G. Chambers i que posteriorment foren ratificats per altres.

Després d'aquesta breu introducció a l'efecte Bohm-Aharanov, es comprovarà que pot interpretar-se com un exemple de la fase de Berry. En efecte, suposem que mitjançant el potencial $V(\vec{r}-\vec{R})$ confinem la partícula q en una caixa cúbica, fora del solenoide i centrada en el punt $\vec{R}$. Llavors, les funcions pròpies del hamiltonià vénen determinades per:

$$\left[\frac{(-i\hbar\nabla - q\vec{A}(\vec{r}))^2}{2m} + V(\vec{r}-\vec{R})\right]\Psi_n(\vec{r};\vec{R}) = E_n\Psi_n(\vec{r};\vec{R}).$$

Aplicant la transformació (19): $\Psi_n = e^{ig(\vec{r})}\Psi'_n$, la funció Ψ'_n, com ja s'ha demostrat, satisfà l'equació de Schrödinger sense $\vec{A}(\vec{r})$, és a dir:

$$-\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}-\vec{R})\right]\Psi'_n(\vec{r}-\vec{R}) = E_n\Psi'_n(\vec{r}-\vec{R})\,.$$

S'ha d'observar que Ψ'_n és una funció de $\vec{r}-\vec{R}$, $\Psi'_n = \Psi'_n(\vec{r}-\vec{R})$, i no com Ψ_n, que és una funció de

$\vec{r}$ i $\vec{R}$ separadament $\Psi_n = \Psi_n(\vec{r}; \vec{R})$. El vector $\vec{R}$ juga el paper d'un paràmetre extern $\overline{q}$, en conseqüència, es transportarà la caixa al llarg d'una trajectòria tancada C al voltant del solenoide i es calcularà la fase de Berry $\gamma_n(C)$.

Primer es calcularà la 1-forma integrant $\overline{A}_{(n)}$, (16):

$$A_{(n)} = i\langle \Psi_n | \nabla_{\vec{R}} \Psi_n \rangle$$

$$\nabla_{\vec{R}} \Psi_n = \nabla_{\vec{R}} (e^{ig} \Psi'_n(\vec{r} - \vec{R})) =$$
$$-i\frac{q}{\hbar}\vec{A}(\vec{R}) e^{ig} \Psi'_n + e^{ig} \nabla_{\vec{R}} \Psi'_n(\vec{r} - \vec{R}) .$$

Per tant,

$$\overline{A}_{(n)} = \frac{q}{\hbar}\vec{A}(\vec{R}) + i\langle \Psi'_n(\vec{r} - \vec{R}) | \nabla_{\vec{R}} \Psi'_n(\vec{r} - \vec{R}) \rangle \, ., \quad (20)$$

Però com que les funcions pròpies Ψ'_n d'una partícula confinada dins d'una caixa són reals, el segon sumand del segon membre de 20 és zero, com ja s'ha demostrat en el primer punt de l'apartat anterior. En conseqüència,

$$\overline{A}_{(n)} = \frac{q}{\hbar}\vec{A}(\vec{R}) \, . \quad (21)$$

Substituint en la fase de Berry, equació (16), s'obté:

$$\gamma_n(C) = \oint_C \overline{A}_{(n)} \cdot d\vec{R} = \frac{q}{\hbar} \oint_C \vec{A}(\vec{R}) \cdot d\vec{R} = \frac{q\Phi}{\hbar} \, ,$$

Cosa que posa en evidència que l'efecte Aharanov-Bohm és un exemple particular de la fase de Berry.

Referències

ALDROVANI, R. i PEREIRA, J. G., *An introduction to Geometrical Physics*, World Scientific (1995).

BERRY, M. V., Anticipations of the geometric phase, *Physics Today*, December, (1990).

GRIFFITHS, D. J., *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice-Hall (1995).

SHAPERE, A. i WILCZEK, F. (ed.), *Geometric Phases in Physics*, World Scientific (1989).