

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

Scuola di Scienze
Dipartimento di Fisica e Astronomia
Corso di Laurea in Fisica

**Approssimazione adiabatica e fase di Berry
con applicazione alla dinamica di uno spin $\frac{1}{2}$
in un campo magnetico**

Relatore:
Prof. ROBERTO ZUCCHINI

Presentata da:
MATILDA PANZA

Sessione III
Anno Accademico 2021/2022

Sommario

In questo lavoro ci serviremo della Teoria Adiabatica per studiare la fase geometrica di Berry che un sistema quantistico acquisisce durante l'evoluzione adiabatica dei suoi parametri lungo un percorso chiuso su uno spazio non banale. Evidenzieremo la rilevanza fisica di tale fase e applicheremo la Teoria di Berry a una particella di spin $\frac{1}{2}$ soggetta a un campo magnetico esterno.

Indice

Introduzione	2
1 Approssimazione adiabatica	4
1.1 Caso non degenere	4
1.2 Caso degenere	9
2 Fase di Berry	13
2.1 Generalità sulla fase di Berry	13
2.2 Fase di Berry in un sistema a due stati	19
2.3 Osservazione sperimentale della fase di Berry per un singolo spin	28
A Trasporto parallelo e ologonomia	30
Bibliografia	33

Introduzione

La premessa fondamentale di questa tesi consiste nel concetto di *adiabaticità*, che in ambito quantistico si realizza nel Teorema Adiabatico formulato da Max Born e Vladimir Fock nel 1928 [1]. In generale esso stabilisce che dato un sistema caratterizzato da una Hamiltoniana dipendente dal tempo adiabaticamente, se questo è in origine preparato in uno stato fisico che sia istantaneamente autostato della sua Hamiltoniana, si conserva in un autostato della Hamiltoniana anche a istanti successivi [2]. Quando un sistema quantomeccanico subisce una trasformazione adiabatica la sua energia non viene conservata, bensì cambia continuamente in rapporto all'evoluzione graduale delle condizioni esterne. Gli ambiti di applicabilità del teorema sono molteplici e spaziano dalla fisica molecolare, alla teoria dei campi quantizzati, alle fasi geometriche. Quest'ultimo dominio in particolare costituisce il nucleo del presente lavoro: se la Hamiltoniana di un sistema quantistico varia adiabaticamente, dopo un'evoluzione ciclica dei parametri ambientali da cui essa dipende, l'autofunzione associata alla Hamiltoniana finale coinciderà con quella relativa alla Hamiltoniana iniziale a meno di una fase. Tale fase può essere decomposta nel prodotto di due fasi di natura diversa: una dinamica, intrinseca all'evoluzione del sistema e dipendente dal tempo e una geometrica, che riflette la topologia del circuito seguito nello spazio dei parametri [3][2].

Dal momento che le quantità fisiche solitamente coinvolgono il modulo quadrato della funzione d'onda che non risente dei fattori di fase acquisiti da quest'ultima, per molto tempo si è stati inclini a sottovalutare l'importanza della fase geometrica. Tuttavia nel corso degli anni '80 Berry dimostrò che la fase geometrica associata alla variazione adiabatica della Hamiltoniana fornisce informazioni significative sulla natura dei processi sottostanti e può essere realmente misurata [4].

Questa tesi è suddivisa in due capitoli principali. Nel primo, si tratta della Teoria Adiabatica per un sistema con spettro energetico completamente discreto e non degenere. Il metodo consente di risolvere l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo, quando la Hamiltoniana del sistema varia lentamente.

Vengono inoltre determinate le condizioni di applicabilità dell'approssimazione, che stabiliscono quanto lenta debba essere l'evoluzione temporale della Hamiltoniana affinché ci si possa considerare in un regime adiabatico.

La seconda parte del primo capitolo generalizza l'intera trattazione precedente a sistemi quantistici con spettro energetico degenere: il problema viene affrontato in modo analogo al caso non degenere, anche se la presenza della degenerazione rende l'analisi più complessa.

La prima parte del secondo capitolo si propone di indagare la fase di Berry di un sistema con spettro energetico discreto e non degenere.

Grazie all'introduzione della teoria matematica dei fibrati, è possibile trattare del fenomeno di *twisting*, che impedisce la definizione degli autostati della Hamiltoniana sull'intero spazio dei parametri.

La problematica viene risolta scegliendo un opportuno ricoprimento dello spazio dei parametri e fissando le fasi degli autostati del sistema su ciascuno degli intorni che lo costituiscono. Seguono quindi le definizioni di *connessione* e *curvatura* di Berry.

Assumendo poi che i parametri della Hamiltoniana dipendano dal tempo e che durante la loro variazione temporale questi seguano un percorso chiuso nello spazio dei parametri, possiamo ricavare l'evoluzione subita dallo stato del sistema usando la Teoria Adiabatica. Tale trasformazione comporta l'acquisizione di una fase dinamica e una topologica, quest'ultima esprimibile nei termini della connessione di Berry.

In una sezione successiva la teoria di Berry trova applicazione al sistema fisico di una particella di spin $\frac{1}{2}$ immersa in un campo magnetico costante uniforme, il cui versore è il parametro che varia lentamente: si ricavano le funzioni di transizione del fibrato e si ottengono gli autostati della Hamiltoniana come funzioni definite localmente su due intorni appartenenti al ricoprimento dello spazio dei parametri.

Nel seguito si scrivono esplicitamente la connessione e la curvatura di Berry per la particella.

L'ultima parte del secondo capitolo affronta il problema della determinazione in laboratorio della fase geometrica e conclude che le misure sperimentali realizzate alla fine degli anni '80 confermano le previsioni basate sulla teoria di Berry.

Capitolo 1

Approssimazione adiabatica

1.1 Caso non degenere

L'*approssimazione adiabatica* in Meccanica Quantistica [5][6][7] costituisce un metodo per individuare soluzioni approssimate dell'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo nei casi in cui la variazione della Hamiltoniana è "lenta", in un senso che verrà di seguito precisato.

Consideriamo un sistema quantomeccanico caratterizzato da una Hamiltoniana dipendente dal tempo $\hat{H}(t)$. L'obiettivo è studiare le soluzioni dell'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (1.1)$$

con condizione iniziale

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_0\rangle \quad (1.2)$$

in cui $\hat{H}(t)$ varia "lentamente".

Assumiamo che per ogni istante di tempo t la Hamiltoniana $\hat{H}(t)$ abbia uno spettro completamente discreto e, per semplicità, non degenere. Fissiamo quindi una base ortonormale $|n; t\rangle$ di autostati di $\hat{H}(t)$, dove con n indichiamo un insieme di numeri quantici discreti. L'equazione agli autovalori avrà pertanto la forma

$$\hat{H}(t) |n; t\rangle = |n; t\rangle w_n(t) \quad (1.3)$$

in cui è stata esplicitata la dipendenza degli autovalori $w_n(t)$ dal tempo t .

In virtù della scelta operata circa la base di autostati di $\hat{H}(t)$, valgono le seguenti relazioni di ortonormalità e completezza:

$$\langle n'; t | n; t \rangle = \delta_{n', n} \quad (1.4)$$

$$\sum_n |n; t\rangle \langle n; t| = \hat{1} \quad (1.5)$$

Per ogni istante di tempo t , il ket di stato $|\psi(t)\rangle$ può essere espanso nella base $|n; t\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n |n; t\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' w_n(t')\right) c_n(t) \quad (1.6)$$

dove i termini dipendenti dal tempo $c_n(t)$ sono i coefficienti dell'espansione, mentre i fattori di fase $\exp(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' w_n(t'))$ sono detti *dinamici* e sono stati separati dai primi per naturalezza.

A partire dall'equazione di Schrödinger 1.1, utilizzando l'equazione agli autovalori 1.3 e la relazione di ortonormalità 1.4, si dimostra che la dipendenza temporale dei coefficienti dell'espansione $c_n(t)$ è governata dall'equazione differenziale

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} c_n(t) = & - \langle n; t | \frac{d}{dt} |n; t\rangle c_n(t) \\ & - \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n; t | \frac{d\hat{H}(t)}{dt} |n'; t\rangle}{w_{n'}(t) - w_n(t)} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (w_{n'}(t') - w_n(t'))\right) c_{n'}(t) \end{aligned} \quad (1.7)$$

con la condizione iniziale

$$c_n(0) = c_{0n} \quad (1.8)$$

derivata dalla 1.2 e dalle relazioni 1.6 e 1.9.

I coefficienti c_{0n} entrano nell'espansione del ket di stato iniziale $|\psi_0\rangle$, in riferimento alla base $|n; 0\rangle$:

$$|\psi_0\rangle = \sum_n |n; 0\rangle c_{0n} \quad (1.9)$$

L'approssimazione adiabatica consiste nel trascurare il secondo termine della parte destra dell'equazione differenziale 1.7, ottenendo:

$$\frac{d}{dt} \tilde{c}_n(t) = a_n(t) \tilde{c}_n(t) \quad (1.10)$$

$$\tilde{c}_n(0) = c_{0n} \quad (1.11)$$

dove abbiamo posto

$$a_n(t) = - \langle n; t | \frac{d}{dt} |n; t\rangle \quad (1.12)$$

La notazione con la tilde richiama il fatto che si stia lavorando con l'approssimante adiabatico di $c_n(t)$.

Vogliamo ora risolvere l'equazione differenziale approssimata 1.10 e determinare le condizioni sotto le quali l'approssimazione adiabatica risulti accurata.

Cominceremo con il trattare la prima questione.

Dalla 1.10, abbiamo:

$$\tilde{c}_n(t) = \exp\left(\int_0^t dt' a_n(t')\right) c_{0n} \quad (1.13)$$

e dalla 1.6 con la 1.13 si ottiene l'approssimante adiabatico $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ di $|\psi(t)\rangle$:

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}(t)\rangle &= \sum_n |n; t\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' w_n(t')\right) \tilde{c}_n(t) \\ &= \sum_n |n; t\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' w_n(t')\right) \exp\left(\int_0^t dt' a_n(t')\right) c_{0n} \end{aligned} \quad (1.14)$$

Se si pone $|\psi_0\rangle = |n_0; 0\rangle$, allora $c_{0n} = \delta_{n, n_0}$ e in questo caso si avrà:

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = |n_0; t\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' w_{n_0}(t')\right) \exp\left(\int_0^t dt' a_{n_0}(t')\right) \quad (1.15)$$

ovvero, $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ è $|n_0; t\rangle$, a meno di una fase dipendente da t . In altre parole, $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ si mantiene nell'autostato corrispondente a $|n_0; t\rangle$ al trascorrere del tempo.

Introducendo la funzione numerica complessa $\mathcal{U}_n(t)$ dipendente dal tempo, noteremo che la soluzione delle 1.10 e 1.11 si ridurrà a quella dell'equazione differenziale

$$\frac{d}{dt} \mathcal{U}_n(t) = a_n(t) \mathcal{U}_n(t) \quad (1.16)$$

la cui condizione iniziale sarà quindi data dalla relazione

$$\mathcal{U}_n(0) = 1 \quad (1.17)$$

Si avrà inoltre che

$$\tilde{c}_n(t) = \mathcal{U}_n(t) c_{0n} \quad (1.18)$$

Assumendo infatti che i coefficienti $\tilde{c}_n(t)$ siano definiti dalla relazione 1.18, a partire dalle 1.16 e 1.17, è possibile verificare rispettivamente le 1.10 e 1.11.

Per un tempo t e un numero quantico n dell'energia fissati, utilizzando la relazione di ortonormalità 1.4, si dimostra il coefficiente $a_n(t)$ sia un numero immaginario:

$$a_n(t)^* = -a_n(t) \quad (1.19)$$

Dalla 1.19 consegue poi che \mathcal{U}_n abbia modulo 1:

$$\mathcal{U}_n(t)^* \mathcal{U}_n(t) = 1 \quad (1.20)$$

Il coefficiente $\tilde{c}_n(t)$ si ottiene quindi agendo con la funzione $\mathcal{U}_n(t)$ sul valore iniziale c_{0n} . Le equazioni complete 1.7 e 1.8 possono essere riscritte nella seguente forma:

$$\frac{d}{dt}c_n(t) = a_n(t)c_n(t) + \sum_{n' \neq n} b_{n,n'}(t)c_{n'}(t) \quad (1.21)$$

$$c_n(0) = c_{0n} \quad (1.22)$$

avendo definito

$$b_{n,n'}(t) = -\frac{\langle n; t | \frac{d\hat{H}(t)}{dt} | n'; t \rangle}{w_{n'}(t) - w_n(t)} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (w_{n'}(t') - w_n(t'))\right) \quad (1.23)$$

Per determinare sotto quali ipotesi l'approssimazione adiabatica sia effettivamente accurata, poniamo:

$$c_n(t) = \mathcal{U}_n(t)c_n^u(t) \quad (1.24)$$

in cui i termini $c_n^u(t)$ si dimostra obbediscano all'equazione differenziale

$$\frac{d}{dt}c_n^u(t) = \sum_{n' \neq n} b_{n,n'}^u(t)c_{n'}^u(t) \quad (1.25)$$

con condizione iniziale

$$c_n^u(0) = c_{0n} \quad (1.26)$$

e dove abbiamo definito

$$b_{n,n'}^u(t) = \mathcal{U}_n(t)^* b_{n,n'}(t) \mathcal{U}_{n'}(t) \quad (1.27)$$

Le relazioni 1.25 e 1.26 sono equivalenti all'equazione integrale

$$c_n^u(t) = c_{0n} + \int_0^t dt' \sum_{n' \neq n} b_{n,n'}^u(t') c_{n'}^u(t') \quad (1.28)$$

e possiamo applicare l'approssimazione adiabatica se si verifica la seguente condizione:

$$|c_n^u(\tau) - c_{0n}| \ll 1 \quad (1.29)$$

per una scala temporale rilevante τ , come emerge dal confronto tra le equazioni 1.18 e 1.24.

Dalla 1.28, utilizzando il risultato di un teorema dell'Analisi, si ha

$$|c_n^u(\tau) - c_{0n}| \leq \tau \sum_{n' \neq n} |b_{n,n'}^u(t^*)| |c_{n'}^u(t^*)| \quad (1.30)$$

dove $0 \leq t^* \leq \tau$.

Dal momento che $|c_n^u(t^*)| \sim |c_{0n}|$, abbiamo

$$|c_n^u(\tau) - c_{0n}| \lesssim \tau \sum_{n' \neq n} |b_{n,n'}^u(t^*)| |c_{0n'}| \quad (1.31)$$

Una condizione sufficiente affinché sia garantita la 1.31 è la seguente:

$$\tau |b_{n,n'}^u(t^*)| \ll 1 \quad (1.32)$$

Tenendo poi in conto le relazioni 1.23 e 1.27, possiamo riscrivere la condizione 1.31:

$$\tau \left| \frac{\langle n; t^* | \frac{d\hat{H}(t^*)}{dt} | n'; t^* \rangle}{w_{n'}(t^*) - w_n(t^*)} \right| \ll 1 \quad (1.33)$$

con $n' \neq n$.

Solitamente si sceglie τ dell'ordine del *periodo di Bohr*

$$\tau \sim \frac{\hbar}{|w_{n'}(t^*) - w_n(t^*)|} \ll 1 \quad (1.34)$$

Sostituendo la 1.34 nella 1.33, otteniamo infine la condizione di validità per l'applicazione dell'approssimazione adiabatica nel caso specifico di un sistema con uno spettro energetico non degenero:

$$\hbar \left| \frac{\langle n; t^* | \frac{d\hat{H}(t^*)}{dt} | n'; t^* \rangle}{(w_{n'}(t^*) - w_n(t^*))^2} \right| \ll 1 \quad (1.35)$$

con $n' \neq n$.

1.2 Caso degenere

Vogliamo ora generalizzare la trattazione della sezione 1.1, tenendo conto dell'eventuale degenerazione degli autovalori della Hamiltoniana $\hat{H}(t)$ del sistema. Assumiamo quindi che per ogni istante di tempo t essa abbia uno spettro completamente discreto, con degenerazione α degli autovalori all'energia non dipendente da t . In questo caso, fissiamo la base ortonormale $|n, \alpha; t\rangle$ di autostati di $\hat{H}(t)$, dove n, α sono entrambi insiemi di numeri quantici discreti. L'equazione agli autovalori sarà quindi la seguente:

$$\hat{H}(t) |n, \alpha; t\rangle = |n, \alpha; t\rangle w_n(t) \quad (1.36)$$

Si noti che gli autovalori $w_n(t)$ dipendono dal tempo e dal solo numero quantico n . Per le proprietà della base scelta, anche in questo caso valgono le relazioni di ortonormalità e completezza

$$\langle n', \alpha'; t | n, \alpha; t \rangle = \delta_{n',n} \delta_{\alpha',\alpha} \quad (1.37)$$

$$\sum_{n,\alpha} |n, \alpha; t\rangle \langle n, \alpha; t| = \hat{1} \quad (1.38)$$

e, in ogni istante di tempo t , il ket di stato $|\psi(t)\rangle$ può essere espanso nella base $|n, \alpha; t\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,\alpha} |n, \alpha; t\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' w_n(t')\right) c_{n,\alpha}(t) \quad (1.39)$$

dove i termini $c_{n,\alpha}(t)$ identificano i coefficienti dell'espansione e i fattori $\exp(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' w_n(t'))$ sono le fasi dinamiche.

La dipendenza dal tempo dei coefficienti $c_{n,\alpha}(t)$ è descritta dall'equazione differenziale

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} c_{n,\alpha}(t) = & - \sum_{\alpha'} \langle n, \alpha; t | \frac{d}{dt} |n, \alpha'; t\rangle c_{n,\alpha'}(t) \\ & - \sum_{n' \neq n, \alpha'} \frac{\langle n, \alpha; t | \frac{d\hat{H}(t)}{dt} |n', \alpha'; t\rangle}{w_{n'}(t) - w_n(t)} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (w_{n'}(t') - w_n(t'))\right) c_{n',\alpha'}(t) \end{aligned} \quad (1.40)$$

generalizzazione dell'equazione 1.7 vista in precedenza, con la condizione iniziale

$$c_{n,\alpha}(0) = c_{0n,\alpha} \quad (1.41)$$

che ora tiene conto anche della degenerazione degli autovalori.

L'espansione del ket di stato iniziale $|\psi_0\rangle$ in riferimento alla base $|n, \alpha; 0\rangle$ si scrive:

$$|\psi_0\rangle = \sum_{n,\alpha} |n, \alpha; 0\rangle c_{0n,\alpha} \quad (1.42)$$

In analogia con il caso non degenere, riscriviamo le equazioni 1.40 e 1.41 applicando l'approssimazione adiabatica:

$$\frac{d}{dt}\tilde{c}_{n,\alpha}(t) = \sum_{\alpha'} a_{n,\alpha,\alpha'}(t)\tilde{c}_{n,\alpha'}(t) \quad (1.43)$$

$$\tilde{c}_{n,\alpha}(0) = c_{0n,\alpha} \quad (1.44)$$

avendo posto

$$a_{n,\alpha,\alpha'}(t) = -\langle n, \alpha; t | \frac{d}{dt} | n, \alpha'; t \rangle \quad (1.45)$$

Ancora una volta utilizziamo la tilde nella notazione per mettere in evidenza l'approssimante adiabatico di $c_{n,\alpha}(t)$.

Ci si propone dunque di risolvere l'equazione 1.43 e determinare le nuove condizioni sotto cui l'approssimazione adiabatica sia valida.

Tenendo conto della degenerazione, la soluzione delle 1.43 e 1.44 viene a coincidere con quella dell'equazione differenziale matriciale

$$\frac{d}{dt}\mathcal{U}_{n,\alpha,\alpha'}(t) = \sum_{\alpha''} a_{n,\alpha,\alpha''}(t)\mathcal{U}_{n,\alpha'',\alpha'}(t) \quad (1.46)$$

con condizione iniziale data dalla relazione

$$\mathcal{U}_{n,\alpha,\alpha'}(0) = \delta_{\alpha,\alpha'} \quad (1.47)$$

per cui si ha che

$$\tilde{c}_{n,\alpha}(t) = \sum_{\alpha'} \mathcal{U}_{n,\alpha,\alpha'}(t)c_{0n,\alpha'} \quad (1.48)$$

Una volta fissati un tempo t e un numero quantico n dell'energia, $a_{n,\alpha',\alpha}(t)$ risulta una matrice antihermitiana, ovvero

$$a_{n,\alpha',\alpha}(t)^* = -a_{n,\alpha,\alpha'}(t) \quad (1.49)$$

La 1.49 comporta che $\mathcal{U}_{n,\alpha,\alpha'}$ sia unitaria:

$$\sum_{\alpha''} \mathcal{U}_{n,\alpha'',\alpha}(t)^* \mathcal{U}_{n,\alpha'',\alpha'}(t) = \delta_{\alpha,\alpha'} \quad (1.50)$$

Il termine $\tilde{c}_{n,\alpha}(t)$ si ottiene applicando la matrice $\mathcal{U}_{n,\alpha,\alpha'}(t)$ al coefficiente iniziale $c_{0n,\alpha}$. Riscriviamo le equazioni complete 1.40 e 1.41 nella seguente forma:

$$\frac{d}{dt}c_{n,\alpha}(t) = \sum_{\alpha'} a_{n,\alpha,\alpha'}(t)c_{n,\alpha'}(t) + \sum_{n' \neq n, \alpha} b_{n,\alpha,n',\alpha'}(t)c_{n',\alpha'}(t) \quad (1.51)$$

$$c_{n,\alpha}(0) = c_{0n,\alpha} \quad (1.52)$$

avendo definito

$$b_{n,\alpha,n',\alpha'}(t) = -\frac{\langle n, \alpha; t | \frac{d\hat{H}(t)}{dt} | n', \alpha'; t \rangle}{w_{n'}(t) - w_n(t)} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (w_{n'}(t') - w_n(t'))\right) \quad (1.53)$$

Si noti l'analogia strutturale di queste relazioni con quelle viste per il caso non degenere: abbiamo ottenuto una generalizzazione delle equazioni 1.21, 1.22 e 1.23 per sistemi caratterizzati da uno spettro energetico discreto con degenerazione α .

Al fine di individuare le ipotesi che garantiscono l'applicabilità dell'approssimazione adiabatica, poniamo:

$$c_{n,\alpha}(t) = \sum_{\alpha'} \mathcal{U}_{n,\alpha,\alpha'}(t) c_{n,\alpha'}^u(t) \quad (1.54)$$

in cui i termini $c_{n,\alpha}^u(t)$ evolvono nel tempo secondo l'equazione differenziale

$$\frac{d}{dt} c_{n,\alpha}^u(t) = \sum_{n' \neq n, \alpha'} b_{n,\alpha,n',\alpha'}^u(t) c_{n',\alpha'}^u(t) \quad (1.55)$$

con condizione iniziale

$$c_{n,\alpha}^u(0) = c_{0n,\alpha} \quad (1.56)$$

e dove abbiamo definito

$$b_{n,\alpha,n',\alpha'}^u(t) = \sum_{\alpha'', \alpha'''} \mathcal{U}_{n,\alpha'',\alpha}(t)^* b_{n,\alpha'',n',\alpha'''}(t) \mathcal{U}_{n',\alpha''',\alpha'}(t) \quad (1.57)$$

Le relazioni 1.55 e 1.56 corrispondono all'equazione integrale

$$c_{n,\alpha}^u(t) = c_{0n,\alpha} + \int_0^t dt' \sum_{n' \neq n, \alpha'} b_{n,\alpha,n',\alpha'}^u(t') c_{n',\alpha'}^u(t') \quad (1.58)$$

e possiamo applicare l'approssimazione adiabatica se si verifica la seguente condizione

$$\left| c_{n,\alpha}^u(\tau) - c_{0n,\alpha} \right| \ll 1 \quad (1.59)$$

per una scala temporale rilevante τ , come si evince confrontando le equazioni 1.48 e 1.54. Dalla 1.58, servendoci del medesimo risultato del teorema dell'Analisi visto per il caso non degenere, si ha

$$\left| c_{n,\alpha}^u(\tau) - c_{0n,\alpha} \right| \leq \tau \sum_{n' \neq n, \alpha'} \left| b_{n,\alpha,n',\alpha'}^u(t^*) \right| \left| c_{n',\alpha'}^u(t^*) \right| \quad (1.60)$$

dove $0 \leq t^* \leq \tau$.

Poichè $|c_{n,\alpha}^u(t^*)| \sim |c_{0n,\alpha}|$, otteniamo la relazione

$$|c_{n,\alpha}^u(\tau) - c_{0n,\alpha}| \lesssim \tau \sum_{n' \neq n, \alpha'} |b_{n,\alpha,n',\alpha'}^u(t^*)| |c_{0n',\alpha'}| \quad (1.61)$$

la quale risulta garantita dalla condizione sufficiente

$$\tau |b_{n,\alpha,n',\alpha'}^u(t^*)| \ll 1 \quad (1.62)$$

Considerando le equazioni 1.53 e 1.57, possiamo riscrivere la condizione 1.61:

$$\tau \left| \frac{\langle n, \alpha; t^* | \frac{d\hat{H}(t^*)}{dt} | n', \alpha'; t^* \rangle}{w_{n'}(t^*) - w_n(t^*)} \right| \ll 1 \quad (1.63)$$

con $n' \neq n$, che differisce dalla 1.33 nella sola scelta della base di autostati del sistema. Anche in presenza di degenerazione, solitamente si sceglie τ dell'ordine del *periodo di Bohr*, quindi, sostituendo la 1.34 nella 1.63, otteniamo infine la condizione di validità più generale per l'applicazione dell'approssimazione adiabatica:

$$\hbar \left| \frac{\langle n, \alpha; t^* | \frac{d\hat{H}(t^*)}{dt} | n', \alpha'; t^* \rangle}{(w_{n'}(t^*) - w_n(t^*))^2} \right| \ll 1 \quad (1.64)$$

con $n' \neq n$.

Capitolo 2

Fase di Berry

2.1 Generalità sulla fase di Berry

Nel 1984 il fisico britannico Michael Victor Berry pubblicò un articolo in cui dimostrava che un sistema quantistico che cambia lentamente nel tempo conserva un "ricordo" della sua evoluzione, una volta ritornato allo stato fisico originario [8]. Trasportando il sistema lungo un percorso chiuso attraverso la variazione adiabatica dei parametri da cui la sua Hamiltoniana dipende, esso infatti acquisisce, in aggiunta al tipico fattore di fase dinamico, un fattore di fase di natura geometrica, che prende il nome di *fase di Berry* [9]. Per definire matematicamente la fase di Berry, si consideri allora un sistema la cui Hamiltoniana $\hat{H}(\lambda)$ dipenda da dei parametri λ , che variano all'interno di un certo spazio Λ . Si assuma inoltre che $\hat{H}(\lambda)$ abbia uno spettro energetico discreto non degenere per ogni valore λ , per cui gli autostati $|n; \lambda\rangle$ e gli autovalori $w_n(\lambda)$ di $\hat{H}(\lambda)$ dipenderanno da λ e saranno indicizzati da un insieme di numeri quantici discreti n .

Mentre sullo spazio dei parametri Λ gli autovalori $w_n(\lambda)$ sono funzioni a un sol valore ben definite, in generale non possiamo dire lo stesso degli autostati $|n; \lambda\rangle$, che risultano soggetti a un'ambiguità nella fase:

$$|n; \lambda\rangle \rightarrow |n; \lambda\rangle e^{i\phi_n(\lambda)} \quad (2.1)$$

Si noti che, in caso di una ridefinizione di tale tipo, rimangono comunque inalterate proprietà fisiche quali la normalizzazione, la probabilità dei valori misurati di un osservabile e il suo valore medio.

Ogni autospazio unidimensionale relativo a uno specifico autovalore $w_n(\lambda)$ costituisce una fibra vettoriale $\mathcal{L}_{n\lambda}$ in corrispondenza di ciascun λ su Λ .

L'insieme delle fibre sullo spazio dei parametri Λ prende il nome di *fibrato di Berry* e verrà indicato nel seguito con la notazione \mathcal{L}_n . In assenza di degenerazione, le fibre vettoriali sono unidimensionali e diciamo \mathcal{L}_n abbia rango 1.

Se le fibre nel loro complesso si presentano "attorcigliate", siamo cioè in presenza di

twisting, i vettori $|n, \lambda\rangle$ non sono funzioni globalmente definite su Λ , ma al più localmente. Inoltre, se Λ non è uno spazio contraibile, è possibile si verifichi il *twisting* delle fibre vettoriali, per cui non riusciamo a fissare l'ambiguità di cui sopra in modo che gli autostati $|n; \lambda\rangle$ divengano funzioni regolari di λ su tutto Λ . Possiamo tuttavia renderli tali su intorno locali aperti contraibili $\mathcal{U} \subset \Lambda$. Scegliamo dunque un ricoprimento aperto $\{\mathcal{U}_i\}$ di Λ in modo che ciascun λ sia interno ad almeno un intorno \mathcal{U}_i e che la fase degli autostati $|n; \lambda\rangle$ possa essere fissata univocamente su ogni \mathcal{U}_i , dando origine a funzioni ben definite $|n; \lambda; i\rangle$.

Dal momento che, preso un parametro λ appartenente al sottoinsieme \mathcal{U}_i del ricoprimento $\{\mathcal{U}_i\}$, il vettore $|n; \lambda; i\rangle$ è una funzione di λ regolare su \mathcal{U}_i , allora per ogni λ scelto nell'intersezione $\mathcal{U}_i \cap \mathcal{U}_j \neq \emptyset$, gli autostati $|n; \lambda; i\rangle$ e $|n; \lambda; j\rangle$ sono entrambi basi dell'autospazio relativo all'autovalore $w_n(\lambda)$.

In virtù della loro normalizzazione, i vettori di stato sono proporzionali secondo la relazione

$$|n; \lambda; i\rangle = e^{i\phi_{nij}(\lambda)} |n; \lambda; j\rangle \quad (2.2)$$

dove le fasi $e^{i\phi_{ij}(\lambda)}$ prendono il nome di *funzioni di transizione del fibrato* e danno informazioni circa il modo in cui le basi locali sono legate nella regione di transizione.

Se l'intersezione è tripla, allora si avrà

$$e^{i\phi_{nij}(\lambda)} e^{i\phi_{njk}(\lambda)} = e^{i\phi_{nik}(\lambda)} \quad (2.3)$$

per ogni λ appartenente a $\mathcal{U}_i \cap \mathcal{U}_j \cap \mathcal{U}_k \neq \emptyset$.

La collezione delle fasi $\{e^{i\phi_{nij}}\}$ individua il fibrato vettoriale di Berry \mathcal{L}_n su Λ , il quale sarà detto *unitario* proprio in virtù del fatto che le funzioni di transizione $e^{i\phi_{nij}}$ da cui origina siano matrici unitarie appartenenti al gruppo $U(1)$, fasi appunto.

Per ogni insieme aperto \mathcal{U}_i appartenente al ricoprimento $\{\mathcal{U}_i\}$ definiamo l'1-forma

$$A_{ni}(\lambda) = \langle n; \lambda; i | d_\Lambda | n; \lambda; i \rangle \quad (2.4)$$

dove d_Λ è il differenziale di De Rham su Λ .

Si dimostra che $A_{ni}(\lambda)$ ha valori nell'algebra di Lie $u(1)$ del gruppo $U(1)$, che consiste dei numeri immaginari:

$$\begin{aligned} 2 \operatorname{Re} A_{ni}(\lambda) &= \langle n; \lambda; i | d_\Lambda | n; \lambda; i \rangle + \langle n; \lambda; i | d_\Lambda | n; \lambda; i \rangle^* \\ &= \langle n; \lambda; i | d_\Lambda | n; \lambda; i \rangle + d_\Lambda \langle n; \lambda; i | n; \lambda; i \rangle \\ &= d_\Lambda (\langle n; \lambda; i | n; \lambda; i \rangle) \\ &= d_\Lambda 1 = 0 \end{aligned} \quad (2.5)$$

da cui consegue che

$$A_{ni}^* = -A_{ni} \quad (2.6)$$

Sull'intersezione $\mathcal{U}_i \cap \mathcal{U}_j \neq \emptyset$, sostituendo la relazione 2.2 nella definizione 2.4, abbiamo:

$$\begin{aligned} A_{ni}(\lambda) &= e^{-i\phi_{nij}(\lambda)} \langle n; \lambda; j | d_\Lambda (|n; \lambda; j\rangle e^{i\phi_{nij}(\lambda)}) \\ &= \langle n; \lambda; j | d_\Lambda |n; \lambda; j\rangle + i \langle n; \lambda; j | n; \lambda; j\rangle d_\Lambda \phi_{nij}(\lambda) \\ &= A_{nj}(\lambda) + id_\Lambda \phi_{nij}(\lambda) \end{aligned} \quad (2.7)$$

per ogni $\lambda \in \mathcal{U}_i \cap \mathcal{U}_j$, da cui

$$A_{ni} = A_{nj} + id_\Lambda \phi_{nij} \quad (2.8)$$

La relazione precedente mostra che $A_{ni} \neq A_{nj}$ per $i \neq j$, in quanto le due 1-forme differiscono tra loro per un termine immaginario $id_\Lambda \phi_{nij}$.

La relazione 2.8 stabilisce che la collezione di 1-forme locali a valori in $u(1)$ $\{A_{ni}\}$ costituisce una connessione del fibrato \mathcal{L}_n chiamata *connessione di Berry* e di seguito indicata con A_n .

La curvatura di A_n su \mathcal{U}_i si ottiene dalla 2-forma

$$F_{ni} = d_\Lambda A_{ni} \quad (2.9)$$

anch'essa a valori nel gruppo $u(1)$.

Sostituendo nella 2.9 la definizione 2.4, ricaviamo più esplicitamente l'espressione

$$\begin{aligned} F_{ni}(\lambda) &= d_\Lambda (\langle n; \lambda; i | \wedge d_\Lambda |n; \lambda; i\rangle) \\ &= d_\Lambda \langle n; \lambda; i | \wedge d_\Lambda |n; \lambda; i\rangle + \langle n; \lambda; i | \wedge d_\Lambda d_\Lambda |n; \lambda; i\rangle \\ &= d_\Lambda \langle n; \lambda; i | \wedge d_\Lambda |n; \lambda; i\rangle \end{aligned} \quad (2.10)$$

dove nell'ultimo passaggio ci siamo serviti della proprietà del differenziale di De Rham per cui $d_\Lambda^2 = 0$.

Usando le relazioni 2.9 e 2.8, nonché la proprietà appena enunciata del differenziale d_Λ , per ogni λ appartenente all'intersezione $\mathcal{U}_i \cap \mathcal{U}_j \neq \emptyset$ si ha

$$\begin{aligned} F_{ni}(\lambda) &= d_\Lambda A_{ni}(\lambda) \\ &= d_\Lambda (A_{nj}(\lambda) + id_\Lambda \phi_{nij}(\lambda)) \\ &= d_\Lambda A_{nj}(\lambda) + id_\Lambda d_\Lambda \phi_{nij}(\lambda) \\ &= d_\Lambda A_{nj}(\lambda) = F_{nj}(\lambda) \end{aligned} \quad (2.11)$$

da cui segue che

$$F_{ni} = F_{nj} \quad (2.12)$$

Si può dimostrare il risultato 2.12 garantisca l'esistenza di una 2-forma F_n definita globalmente su Λ , tale che

$$F_n \Big|_{\mathcal{U}_i} = F_{ni} \quad (2.13)$$

per ogni intorno \mathcal{U}_i del ricoprimento $\{\mathcal{U}_i\}$.

F_n ha anch'essa valori in $u(1)$ e prende il nome di *curvatura di Berry*.

Definiamo la *sezione del fibrato* come una funzione S dallo spazio dei parametri Λ al fibrato di Berry \mathcal{L}_n

$$S : \Lambda \longrightarrow \mathcal{L}_n \quad (2.14)$$

tale che $S(\lambda)$ sia un vettore sulla fibra $\mathcal{L}_{n\lambda}$.

Per ogni $\lambda \in \Lambda$ per cui possiamo definire un autoket $|\psi(\lambda)\rangle \neq 0$ appartenente all'autovalore $w_n(\lambda)$ di $\hat{H}(\lambda)$, è evidente che $|\psi(\lambda)\rangle$ dovrà risiedere nell'autospazio dell'autovalore $w_n(\lambda)$, ovvero nella fibra vettoriale $\mathcal{L}_{n\lambda}$. L'autostato $|\psi(\lambda)\rangle$, giacendo sulla fibra $\mathcal{L}_{n\lambda}$, costituisce dunque una sezione del fibrato \mathcal{L}_n e può pertanto essere espresso nella forma

$$|\psi(\lambda)\rangle = |n; \lambda; i\rangle c_i(\lambda) \quad (2.15)$$

per ogni $\lambda \in \mathcal{U}_i$, dove $c_i(\lambda)$ è un coefficiente complesso associato all'intorno \mathcal{U}_i e dipendente dal parametro λ . Poichè nel sistema non degenera in esame la fibra vettoriale è unidimensionale, ritroviamo un unico coefficiente nell'espansione del ket $|\psi(\lambda)\rangle$.

Si noti che in presenza di *twisting* devono necessariamente esistere su Λ dei valori di λ per cui $|\psi(\lambda)\rangle = 0$, altrimenti potremmo definire globalmente un autostato $|\psi(\lambda)\rangle = |n; \lambda\rangle$, mentre sappiamo che ciò è possibile solo se il fibrato è banale.

Dalle equazioni 2.2 e 2.15 abbiamo che sull'intersezione $\mathcal{U}_i \cap \mathcal{U}_j \neq \emptyset$ valga la serie di uguaglianze

$$|n; \lambda; i\rangle c_i(\lambda) = |\psi(\lambda)\rangle = |n; \lambda; j\rangle c_j(\lambda) = |n; \lambda; i\rangle e^{-i\phi_{nij}(\lambda)} c_j(\lambda) \quad (2.16)$$

da cui ricaviamo la relazione tra i coefficienti complessi

$$c_i = e^{-i\phi_{nij}} c_j \quad (2.17)$$

Supponiamo ora di rendere λ una funzione del tempo t , diciamo $\lambda(t)$, e che nell'intervallo $0 \leq t \leq \tau$ questa descriva un percorso chiuso C sullo spazio dei parametri Λ , per cui

$$\lambda(0) = \lambda(\tau)$$

In generale, il percorso C attraverserà un numero p di intorni \mathcal{U}_i del ricoprimento $\{\mathcal{U}_i\}$ di Λ , quindi possiamo pensare di suddividere l'intervallo di tempo $0 \leq t \leq \tau$ in una sequenza di sottointervalli

$$t_0 = 0 \leq t \leq t_1, \quad t_1 \leq t \leq t_2, \quad \dots, \quad t_{p-1} \leq t \leq t_p = \tau$$

tale che in ogni sottointervallo $t_{i-1} \leq t \leq t_i$, $\lambda(t) \in \mathcal{U}_i$ per $i = 1, \dots, p$.

Supponiamo inoltre siano soddisfatte le condizioni di adiabaticità, per cui per il Teorema

Adiabatico avremo che se il ket di stato $|\psi(t_{i-1})\rangle \in \mathcal{L}_{n\lambda}(t_{i-1})$, al trascorrere del tempo $|\psi(t_i)\rangle \in \mathcal{L}_{n\lambda}(t_i)$ con

$$|\psi(t_i)\rangle = |n; \lambda(t_i); i\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_{i-1}}^{t_i} dt w_n(\lambda(t))\right) \exp\left(-\int_{t_{i-1}}^{t_i} dt \langle n; \lambda(t); i | \frac{d}{dt} |n; \lambda(t); i\rangle\right) \langle n; \lambda(t_{i-1}); i | \psi(t_{i-1})\rangle \quad (2.18)$$

Dal momento che vale la relazione

$$\langle n; \lambda(t); i | \frac{d}{dt} |n; \lambda(t); i\rangle = \sum_{\alpha} \frac{d\lambda^{\alpha}(t)}{dt} \langle n; \lambda; i | \frac{\partial}{\partial \lambda^{\alpha}} |n; \lambda; i\rangle \Big|_{\lambda=\lambda(t)} \quad (2.19)$$

possiamo riscrivere l'integrale nel secondo esponenziale della 2.18 come segue:

$$\int_{t_{i-1}}^{t_i} dt \langle n; \lambda(t); i | \frac{d}{dt} |n; \lambda(t); i\rangle = \int_{t_{i-1}}^{t_i} dt \sum_{\alpha} \frac{d\lambda^{\alpha}(t)}{dt} \langle n; \lambda; i | \frac{\partial}{\partial \lambda^{\alpha}} |n; \lambda; i\rangle \Big|_{\lambda=\lambda(t)} \quad (2.20) \\ = \int_{C_i} A_{ni}$$

dove C_i è il segmento di C percorso da $\lambda(t)$ per $t_{i-1} \leq t \leq t_i$.

Sostituendo il risultato 2.20 nella 2.18 otterremo:

$$|\psi(t_i)\rangle = |n; \lambda(t_i); i\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_{i-1}}^{t_i} dt w_n(\lambda(t))\right) \exp\left(-\int_{C_i} A_{ni}\right) \langle n; \lambda(t_{i-1}); i | \psi(t_{i-1})\rangle \\ = |n; \lambda(t_i); i\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_{i-1}}^{t_i} dt w_n(\lambda(t))\right) \exp\left(-\int_{C_i} A_{ni}\right) \\ e^{-i\phi_{ni(i-1)}(\lambda(t_{i-1}))} \langle n; \lambda(t_{i-1}); i-1 | \psi(t_{i-1})\rangle \quad (2.21)$$

che permette il calcolo ricorsivo di $|\psi(\tau)\rangle$ nei termini di $|\psi(0)\rangle$:

$$|\psi(\tau)\rangle = |n; \lambda(\tau); p\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^{\tau} dt w_n(\lambda(t))\right) \prod_{i=1}^p \exp\left(-\int_{C_i} A_{ni}\right) \prod_{i=1}^{p-1} e^{-i\phi_{n(i+1)i}(\lambda(t_i))} \langle n; \lambda(0); 1 | \psi(0)\rangle \quad (2.22)$$

Poichè dalle ipotesi abbiamo che $\lambda(\tau) = \lambda(0)$, possiamo riscrivere l'equazione 2.22 come:

$$|\psi(\tau)\rangle = |n; \lambda(0); p\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^{\tau} dt w_n(\lambda(t))\right) \prod_{i=1}^p \exp\left(-\int_{C_i} A_{ni}\right) \prod_{i=1}^p e^{-i\phi_{ni+1i}(\lambda(t_i))} \langle n; \lambda(0); 1 | \psi(0)\rangle \quad (2.23)$$

dove abbiamo posto $p + 1 \equiv 1$, in quanto assumiamo per convenzione che $\mathcal{U}_{p+1} = \mathcal{U}_1$.
L'espressione

$$\exp\left(-\oint_C A_n\right) = \prod_{i=1}^p \exp\left(-\int_{C_i} A_{ni}\right) \prod_{i=1}^p e^{-i\phi_{n(i+1)i}(\lambda(t_i))} \in U(1) \quad (2.24)$$

rappresenta l'*olonomia* della connessione di Berry A_n lungo il percorso chiuso C sullo spazio dei parametri Λ e prende il nome di fase di Berry.

Il concetto di olonomia di una connessione viene trattato in modo più approfondito e dettagliato nella appendice A.

Servendoci della definizione 2.24 riscriviamo infine l'equazione 2.23:

$$|\psi(\tau)\rangle = |n; \lambda(0); 1\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^\tau dt w_n(\lambda(t))\right) \exp\left(-\oint_C A_n\right) \langle n; \lambda(0); 1 | \psi(0)\rangle \quad (2.25)$$

2.2 Fase di Berry in un sistema a due stati

Un esempio notevole di fase geometrica di Berry si incontra nello studio dell'accoppiamento di una particella di spin $\frac{1}{2}$ con un campo magnetico esterno uniforme. Tale sistema a due stati costituisce infatti una delle applicazioni più immediate della teoria formale presentata nella sezione 2.1, nonché uno dei casi più frequenti incontrati in situazioni sperimentalmente rilevanti [10].

Si consideri dunque una particella con spin $\frac{1}{2}$ e momento magnetico di spin definito dalla relazione quantistica

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \hbar\gamma\hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (2.26)$$

nella quale la proporzionalità tra il momento magnetico $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ e lo spin $\frac{\hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2}$, in cui $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ indica l'operatore di Pauli, è regolata dal coefficiente 2γ , misurato in $[Gs]^{-1}$ nel sistema *cgs*.

Assumiamo la particella sia immersa in un campo magnetico uniforme costante

$$\mathbf{B} = B\mathbf{n} \quad (2.27)$$

la cui direzione è individuata dal versore \mathbf{n} , che impiegheremo come parametro per il sistema. Trattandosi di un vettore unitario, lo spazio dei parametri entro cui \mathbf{n} potrà variare coinciderà necessariamente con la sfera unitaria $S^2 \subseteq \mathbb{R}^3$.

Sulla base della definizione dell'energia di accoppiamento tra momento magnetico e campo magnetico fornita dall'elettrodinamica, costruiamo la Hamiltoniana della particella nella forma seguente

$$\hat{H}(\mathbf{n}) = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} = -\hbar\gamma B\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (2.28)$$

dove nel secondo passaggio abbiamo sostituito all'operatore $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ e al vettore \mathbf{B} le espressioni esplicite 2.26 e 2.27 rispettivamente.

La teoria spettrale dell'operatore $\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ è nota dal formalismo di Pauli: in generale, esso possiede due autostati $|\mathbf{n}, \pm 1\rangle$, appartenenti agli autovalori ± 1 e dipendenti dal versore \mathbf{n} :

$$\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{n}, \pm 1\rangle = |\mathbf{n}, \pm 1\rangle (\pm 1) \quad (2.29)$$

Gli autostati $|\mathbf{n}, \pm 1\rangle$ costituiscono una base ortonormale, in quanto verificano le relazioni di ortonormalità e completezza:

$$\langle \mathbf{n}, \pm 1 | \mathbf{n}, \pm 1 \rangle = 1 \quad \langle \mathbf{n}, \pm 1 | \mathbf{n}, \mp 1 \rangle = 0 \quad (2.30)$$

$$|\mathbf{n}, +1\rangle \langle \mathbf{n}, +1| + |\mathbf{n}, -1\rangle \langle \mathbf{n}, -1| = \hat{1} \quad (2.31)$$

In virtù del teorema spettrale, possiamo inoltre impiegare gli autostati di $\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ per espandere l'operatore nella maniera seguente:

$$\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = |\mathbf{n}, +1\rangle \langle \mathbf{n}, +1| - |\mathbf{n}, -1\rangle \langle \mathbf{n}, -1| \quad (2.32)$$

Si noti che, essendo \mathbf{n} reale, $\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ risulta anche autoaggiunto[11].

Dal momento che la Hamiltoniana definita in 2.28 è proporzionale all'operatore $\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$

secondo il coefficiente numerico $-\hbar\gamma B$, gli autostati $|\mathbf{n}, \pm 1\rangle$ dell'operatore $\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ saranno autostati anche della Hamiltoniana $\hat{H}(\mathbf{n})$, per cui l'equazione agli autovalori del sistema a due stati assumerà la forma

$$\hat{H}(\mathbf{n}) |\mathbf{n}, \pm 1\rangle = |\mathbf{n}, \pm 1\rangle w_{\pm 1} \quad (2.33)$$

in cui i termini

$$w_{\pm 1} = \mp \hbar\gamma B \quad (2.34)$$

individuano gli autovalori della particella.

Contrariamente agli autostati, essi non dipendono dal parametro \mathbf{n} e sono non degeneri per ogni $B \neq 0$.

Sono ora verificate tutte le ipotesi poste all'inizio della sezione 2.1 per l'individuazione della fase di Berry in un sistema quantistico: la Hamiltoniana $\hat{H}(\lambda)$ dipendente dal parametro λ , corrisponde nel caso in esame alla Hamiltoniana $\hat{H}(\mathbf{n})$ dipendente dal versore \mathbf{n} , il quale varia nello spazio dei parametri S^2 così come λ variava all'interno di Λ . Anche l'assunzione che $\hat{H}(\lambda)$ avesse unicamente autovalori $w_n(\lambda)$, indicizzati dal numero quantico discreto n e non degeneri per ogni λ , viene soddisfatta nel sistema della particella, infatti lo spettro energetico di $\hat{H}(\mathbf{n})$ conta due soli autovalori $w_{\pm 1}$, associati ai numeri quantici ± 1 . L'unica distinzione che esiste tra gli autovalori $w_n(\lambda)$ e $w_{\pm 1}$ consiste nell'assenza di dipendenza degli ultimi dal parametro caratteristico del sistema: è questa una particolarità specifica del modello della particella con spin $\frac{1}{2}$ in campo magnetico, il caso più generale della Teoria di Berry ammette che gli autovalori dipendano dal parametro sopracitato. Si mantiene invece perfetta la corrispondenza tra gli autostati $|n, \lambda\rangle$ di $\hat{H}(\lambda)$ e $|\mathbf{n}, \pm 1\rangle$ di $\hat{H}(\mathbf{n})$.

La teoria di Pauli [11] ci permette inoltre di riscrivere gli autostati di $\hat{H}(\mathbf{n})$ nella seguente forma

$$|\mathbf{n}, \pm 1\rangle = \exp\left(i\frac{\theta}{2}\mathbf{k} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) |e_0, \pm 1\rangle \quad (2.35)$$

dove e_0 rappresenta un vettore unitario che scegliamo come riferimento, mentre l'angolo θ e il versore \mathbf{k} sono dati dalle espressioni

$$\cos \theta = \mathbf{n} \cdot e_0 \quad (2.36)$$

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{n} \times e_0}{|\mathbf{n} \times e_0|} \quad (2.37)$$

Il termine esponenziale nella 2.35 è il cosiddetto *esponenziale di Pauli* ed è esplicitamente esprimibile nei termini di θ e \mathbf{k} attraverso la relazione

$$\exp\left(i\frac{\theta}{2}\mathbf{k} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) = \cos\frac{\theta}{2}\hat{1} + i\sin\frac{\theta}{2}\mathbf{k} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (2.38)$$

Dall'equazione 2.37 vediamo che il versore \mathbf{k} è singolare per $\mathbf{n} = \pm \mathbf{e}_0$, così come la combinazione

$$\sin \frac{\theta}{2} \mathbf{k} = \left[\frac{1}{2}(1 - \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0) \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0}{[1 - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0)^2]^{\frac{1}{2}}} = \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0}{[2(1 + \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0)]^{\frac{1}{2}}} \quad (2.39)$$

non è ben definita per $\mathbf{n} = -\mathbf{e}_0$, nonostante lo sia per $\mathbf{n} = \mathbf{e}_0$. Ne deduciamo che gli autoket $|\mathbf{n}, \pm 1\rangle$ siano funzioni regolari di \mathbf{n} solo su intorni locali aperti \mathcal{U} di \mathbb{S}^2 del tipo seguente:

$$\mathcal{U} = \{ \mathbf{n} \mid \mathbf{n} \in \mathbb{S}^2, \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0 > -1 \} \quad (2.40)$$

L'impossibilità di ottenere funzioni globalmente definite sullo spazio dei parametri testimonia la presenza di twisting nelle fibre vettoriali del fibrato di Berry del sistema, per cui, seguendo la logica già illustrata nel corso della sezione 2.1, sceglieremo ora un ricoprimento $\{\mathcal{U}_i\}$ di \mathbb{S}^2 in modo che ciascuno degli autostati $|\mathbf{n}, \pm 1\rangle$ risulti regolare su un aperto \mathcal{U}_i . Tenendo conto della parametrizzazione 2.40, per coprire interamente la sfera \mathbb{S}^2 basteranno due soli aperti: prendendo come versore di riferimento \mathbf{e}_0 , otterremo l'intorno \mathcal{U}_N , mentre scegliendo $-\mathbf{e}_0$, individueremo \mathcal{U}_S .

Su \mathcal{U}_N le relazioni 2.36 e 2.37 assumeranno rispettivamente la forma

$$\cos \theta_N = \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0 \quad (2.41)$$

$$\mathbf{k}_N = \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0}{|\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0|} \quad (2.42)$$

mentre su \mathcal{U}_S , avremo analogamente

$$\cos \theta_S = \mathbf{n} \cdot (-\mathbf{e}_0) = -\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0 \quad (2.43)$$

$$\mathbf{k}_S = \frac{\mathbf{n} \times (-\mathbf{e}_0)}{|\mathbf{n} \times (-\mathbf{e}_0)|} = -\frac{\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0}{|\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0|} \quad (2.44)$$

Vogliamo ora ricavare le funzioni di transizione del fibrato di Berry che ha come base lo spazio dei parametri \mathbb{S}^2 .

Innanzitutto, confrontando le 2.41, 2.42 con le 2.43, 2.44 e tenendo conto che θ_N e θ_S assumono valori nell'intervallo $[0, \pi]$ e hanno coseni tra loro opposti, abbiamo che sull'intersezione $\mathcal{U}_N \cap \mathcal{U}_S$ varranno le relazioni

$$\theta_S = \pi - \theta_N \quad (2.45)$$

$$\mathbf{k}_S = -\mathbf{k}_N \quad (2.46)$$

Dal momento che la 2.29 vale per ogni versore \mathbf{n} , scegliendo $\mathbf{n} = \mathbf{e}_0$, avremo poi che i ket $|\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle$ saranno autostati dell'operatore $\mathbf{e}_0 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ e verificheranno l'equazione agli autovalori

$$\mathbf{e}_0 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle = |\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle (\pm 1) \quad (2.47)$$

Moltiplicando per -1 entrambi i membri 2.47, otteniamo la relazione

$$-\mathbf{e}_0 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle = |\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle (\mp 1) \quad (2.48)$$

che mostra $|\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle$ sia un autoket di $-\mathbf{e}_0 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ con autovalore ∓ 1 .

Dalle 2.47 e 2.48 deduciamo quindi la seguente uguaglianza:

$$|-\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle = |\mathbf{e}_0, \mp 1\rangle \quad (2.49)$$

Sulla base di queste considerazioni e della formula 2.35, possiamo scrivere l'espressione per l'autostato della particella definito sull'intorno \mathcal{U}_S :

$$\begin{aligned} |\mathbf{n}, \pm 1, S\rangle &= \exp\left(i\frac{\theta_S}{2}\mathbf{k}_S \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) |-\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle \\ &= \exp\left(i\frac{\theta_N}{2}\mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) \exp\left(-i\frac{\theta_N}{2}\mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) \exp\left(i\frac{\theta_S}{2}\mathbf{k}_S \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) |\mathbf{e}_0, \mp 1\rangle \quad (2.50) \\ &= \exp\left(i\frac{\theta_N}{2}\mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) \exp\left(\frac{i}{2}(\theta_S\mathbf{k}_S - \theta_N\mathbf{k}_N) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) |-\mathbf{e}_0, \mp 1\rangle \end{aligned}$$

dove nel secondo passaggio ci siamo serviti per l'appunto della 2.49.

Valendo la 2.46, gli operatori $-i\frac{\theta_N}{2}\mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ e $i\frac{\theta_S}{2}\mathbf{k}_S \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ commutano tra loro, per cui possiamo combinare i corrispondenti esponenziali di matrice e ottenere così l'uguaglianza finale della 2.50.

Prendiamo ora in esame proprio il secondo esponenziale di matrice nell'ultimo passaggio della precedente relazione: la combinazione lineare degli angoli θ_S e θ_N con i versori \mathbf{k}_S e \mathbf{k}_N può essere riscritta inserendo al posto dei parametri θ_S e \mathbf{k}_S le espressioni 2.45 2.46:

$$\theta_S\mathbf{k}_S - \theta_N\mathbf{k}_N = -(\pi - \theta_N)\mathbf{k}_N - \theta_N\mathbf{k}_N = -\pi\mathbf{k}_N \quad (2.51)$$

Sostituendo questo risultato nell'esponenziale di cui sopra e usando la definizione 2.38, otteniamo:

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{i}{2}(\theta_S\mathbf{k}_S - \theta_N\mathbf{k}_N) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) &= \exp\left(\frac{i}{2}(-\pi\mathbf{k}_N) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) \\ &= \cos\left(-\frac{\pi}{2}\right)\hat{1} + i\sin\left(-\frac{\pi}{2}\right)\mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (2.52) \\ &= -i\mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \end{aligned}$$

Applichiamo poi gli operatori nella 2.52 agli autoket $|\mathbf{e}_0, \mp 1\rangle$ per avere la seguente espressione:

$$\exp\left(\frac{i}{2}(\theta_S\mathbf{k}_S - \theta_N\mathbf{k}_N) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) |\mathbf{e}_0, \mp 1\rangle = -i\mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, \mp 1\rangle \quad (2.53)$$

Utilizzando la relazione

$$\mathbf{a} \cdot \langle \mathbf{e}_0, \pm 1 | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \mathbf{e}_0, \pm 1 \rangle = \pm \mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_0 \quad (2.54)$$

valida per ogni vettore \mathbf{a} , nonchè la proprietà

$$\mathbf{k}_N \cdot \mathbf{e}_0 = 0 \quad (2.55)$$

che discende dalla definizione 2.37, possiamo riscrivere il membro destro della 2.53 per il ket $|\mathbf{e}_0, -1\rangle$:

$$\begin{aligned} -i\mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, -1\rangle &= -i \hat{1} \mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, -1\rangle \\ &= -i[|\mathbf{e}_0, +1\rangle \langle \mathbf{e}_0, +1| + |\mathbf{e}_0, -1\rangle \langle \mathbf{e}_0, -1|] \mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, -1\rangle \\ &= -i|\mathbf{e}_0, +1\rangle \langle \mathbf{e}_0, +1| \mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, -1\rangle - i|\mathbf{e}_0, -1\rangle \langle \mathbf{e}_0, -1| \mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, -1\rangle \\ &= -i|\mathbf{e}_0, +1\rangle \langle \mathbf{e}_0, +1| \mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, -1\rangle - i|\mathbf{e}_0, -1\rangle \mathbf{k}_N \langle \mathbf{e}_0, -1| \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, -1\rangle \\ &= -i|\mathbf{e}_0, +1\rangle \langle \mathbf{e}_0, +1| \mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, -1\rangle + i|\mathbf{e}_0, -1\rangle \mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ &= -i|\mathbf{e}_0, +1\rangle \langle \mathbf{e}_0, +1| \mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, -1\rangle \end{aligned} \quad (2.56)$$

dove nei primi passaggi ci siamo serviti della relazione di completezza valida per gli autostati dell'operatore $\mathbf{e}_0 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ in virtù della 2.31.

Seguendo il medesimo procedimento possiamo rielaborare il membro destro della 2.53 per il ket $|\mathbf{e}_0, +1\rangle$, ottenendo

$$-i\mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, +1\rangle = -i|\mathbf{e}_0, -1\rangle \langle \mathbf{e}_0, -1| \mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, +1\rangle \quad (2.57)$$

Riportando i risultati 2.56 e 2.57 nella 2.53, possiamo infine scrivere con una notazione più compatta:

$$\exp\left(\frac{i}{2}(\theta_S \mathbf{k}_S - \theta_N \mathbf{k}_N) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) |\mathbf{e}_0, \mp 1\rangle = |\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle \langle \mathbf{e}_0, \pm 1| - i\mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, \mp 1\rangle \quad (2.58)$$

Dal momento che l'esponenziale di Pauli è un operatore unitario che preserva la normalizzazione e che tutti gli autostati nella 2.58 sono normalizzati, il secondo termine del membro destro deve avere modulo 1 ed essere pertanto un fattore di fase:

$$e^{i\phi_{\pm 1SN}(\mathbf{n})} = \langle \mathbf{e}_0, \pm 1| - i\mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} |\mathbf{e}_0, \mp 1\rangle \quad (2.59)$$

Gli elementi di matrice nella 2.59 costituiscono dunque le funzioni di transizione del fibrato di Berry del sistema, pertanto lo definiscono compiutamente.

Inserendo il risultato 2.59 nella 2.58, abbiamo

$$\exp\left(\frac{i}{2}(\theta_S \mathbf{k}_S - \theta_N \mathbf{k}_N) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) |\mathbf{e}_0, \mp 1\rangle = |\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle e^{i\phi_{\pm 1SN}(\mathbf{n})} \quad (2.60)$$

e sostituendo a sua volta la 2.60 nella 2.50, otteniamo infine:

$$|\mathbf{n}, \pm 1, S\rangle = \exp\left(\frac{i}{2}\theta_N \mathbf{k}_N \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) |\mathbf{e}_0, \pm 1\rangle e^{i\phi_{\pm 1SN}(\mathbf{n})} = |\mathbf{n}, \pm 1, N\rangle e^{i\phi_{\pm 1SN}(\mathbf{n})} \quad (2.61)$$

che mostra la relazione esistente tra l'autostato $|\mathbf{n}, \pm 1, S\rangle$, regolare sull'aperto \mathcal{U}_S , e $|\mathbf{n}, \pm 1, N\rangle$, definito in maniera analoga rispetto al primo e regolare su \mathcal{U}_N .

Sulla base della definizione 2.4, le connessioni di Berry relative agli autovalori $w_{\pm 1}$ sugli intorni \mathcal{U}_S e \mathcal{U}_N saranno date rispettivamente dalle espressioni

$$\begin{aligned} A_{\pm 1, S}(\mathbf{n}) &= \langle \mathbf{n}, \pm 1, S | \wedge d_{\mathbf{n}} | \mathbf{n}, \pm 1, S \rangle \\ A_{\pm 1, N}(\mathbf{n}) &= \langle \mathbf{n}, \pm 1, N | \wedge d_{\mathbf{n}} | \mathbf{n}, \pm 1, N \rangle \end{aligned} \quad (2.62)$$

dove abbiamo indicato con $d_{\mathbf{n}}$ il differenziale di De Rham dello spazio dei parametri \mathbb{S}^2 . Le curvature di Berry associate alle connessioni 2.62, tenuto conto della definizione generale 2.10, avranno la forma

$$\begin{aligned} F_{\pm 1, S}(\mathbf{n}) &= d_{\mathbf{n}} \langle \mathbf{n}, \pm 1, S | \wedge d_{\mathbf{n}} | \mathbf{n}, \pm 1, S \rangle \\ F_{\pm 1, N}(\mathbf{n}) &= d_{\mathbf{n}} \langle \mathbf{n}, \pm 1, N | \wedge d_{\mathbf{n}} | \mathbf{n}, \pm 1, N \rangle \end{aligned} \quad (2.63)$$

Dalla 2.8 sappiamo che su $\mathcal{U}_N \cap \mathcal{U}_S$ esiste tra le connessioni $A_{\pm 1, S}(\mathbf{n})$ e $A_{\pm 1, N}(\mathbf{n})$ la seguente relazione:

$$A_{\pm 1, S}(\mathbf{n}) = A_{\pm 1, N}(\mathbf{n}) + i d_{\mathbf{n}} \phi_{\pm 1, SN} \quad (2.64)$$

Le curvature $F_{\pm 1, S}(\mathbf{n})$ e $F_{\pm 1, N}(\mathbf{n})$, invece, coincideranno sull'intersezione, come prescritto dalla 2.12.

Utilizzando una notazione più compatta, possiamo definire la connessione e la curvatura di Berry per un intorno \mathcal{U} del ricoprimento di \mathbb{S}^2 come segue:

$$\begin{aligned} A_{\pm 1}(\mathbf{n}) &= \langle \mathbf{n}, \pm 1 | \wedge d_{\mathbf{n}} | \mathbf{n}, \pm 1 \rangle \\ F_{\pm 1}(\mathbf{n}) &= d_{\mathbf{n}} \langle \mathbf{n}, \pm 1 | \wedge d_{\mathbf{n}} | \mathbf{n}, \pm 1 \rangle \end{aligned} \quad (2.65)$$

Da queste relazioni, attraverso il calcolo esplicito, possiamo poi ricavare le espressioni finali:

$$A_{\pm 1}(\mathbf{n}) = \pm \frac{i}{2} \frac{\mathbf{n} \times d\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0}{1 + \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0} \quad (2.66)$$

$$F_{\pm 1}(\mathbf{n}) = \pm \frac{i}{4} \mathbf{n} \cdot d\mathbf{n} \times d\mathbf{n} \quad (2.67)$$

Dimostrazione. Servendoci della definizione dell'esponenziale di Pauli 2.38, possiamo scrivere

$$\begin{aligned}
& \exp\left(-\frac{i}{2}\theta\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)d\exp\left(\frac{i}{2}\theta\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) \\
&= \left[\cos\frac{\theta}{2}\hat{1} - i\sin\frac{\theta}{2}\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right]d\left[\cos\frac{\theta}{2}\hat{1} + i\sin\frac{\theta}{2}\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right] \\
&= \left[\cos\frac{\theta}{2}\hat{1} - i\sin\frac{\theta}{2}\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right]\left[-\frac{1}{2}\sin\frac{\theta}{2}d\theta\hat{1} + \frac{i}{2}\cos\frac{\theta}{2}d\theta\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} + i\sin\frac{\theta}{2}d\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right] \\
&= -\frac{1}{2}\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}d\theta\hat{1} + \frac{i}{2}\cos^2\frac{\theta}{2}d\theta\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} + i\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}d\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} \\
&\quad + \frac{i}{2}\sin^2\frac{\theta}{2}d\theta\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{1}{2}\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}d\theta(\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 + \sin^2\frac{\theta}{2}\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}d\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} \\
&= \frac{i}{2}d\theta\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{1}{4}\sin\theta d\theta(\mathbf{k}^2 - 1)\hat{1} + \frac{i}{2}\sin\theta d\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{1}{2}(1 - \cos\theta)(\mathbf{k}\cdot d\mathbf{k}\hat{1} + i\mathbf{k}\times d\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}) \\
&= \frac{i}{2}(d\theta\mathbf{k} + \sin\theta d\mathbf{k} + (1 - \cos\theta)\mathbf{k}\times d\mathbf{k})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}
\end{aligned} \tag{2.68}$$

dove ci siamo serviti delle seguenti proprietà del versore \mathbf{k} :

$$\begin{aligned}
\mathbf{k}^2 &= 1 \\
\mathbf{k}\cdot d\mathbf{k} &= 0
\end{aligned} \tag{2.69}$$

Utilizzando il risultato 2.68, avremo:

$$\begin{aligned}
& \langle \mathbf{e}_0, \pm 1 | \exp\left(-\frac{i}{2}\theta\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)d\exp\left(\frac{i}{2}\theta\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) | \mathbf{e}_0, \pm 1 \rangle \\
&= \frac{i}{2}(d\theta\mathbf{k} + \sin\theta d\mathbf{k} + (1 - \cos\theta)\mathbf{k}\times d\mathbf{k})\cdot \langle \mathbf{e}_0, \pm 1 | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \mathbf{e}_0, \pm 1 \rangle
\end{aligned} \tag{2.70}$$

Usando poi la relazione 2.54, otteniamo l'espressione

$$\begin{aligned}
& \langle \mathbf{e}_0, \pm 1 | \exp\left(-\frac{i}{2}\theta\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)d\exp\left(\frac{i}{2}\theta\mathbf{k}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) | \mathbf{e}_0, \pm 1 \rangle \\
&= \pm \frac{i}{2}(d\theta\mathbf{k} + \sin\theta d\mathbf{k} + (1 - \cos\theta)\mathbf{k}\times d\mathbf{k})\cdot \mathbf{e}_0
\end{aligned} \tag{2.71}$$

Nel sistema in esame $\cos\theta$ e \mathbf{k} sono dati rispettivamente dalle espressioni 2.36 e 2.37, inoltre $d \equiv d_n$, per cui il lato sinistro della 2.71 è la connessione di Berry $A_{\pm 1}(\mathbf{n})$.

Dalla definizione 2.37, deduciamo la proprietà

$$\mathbf{k}\cdot \mathbf{e}_0 = 0 \tag{2.72}$$

che ci permette di semplificare la 2.71, ottenendo

$$A_{\pm 1}(\mathbf{n}) = \pm \frac{i}{2}(1 - \cos \theta) \mathbf{k} \times d_n \mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_0 \quad (2.73)$$

La curvatura è data in generale dalla definizione dalla 2.9, che può essere riscritta per il sistema della particella come

$$F_{\pm 1}(\mathbf{n}) = d_n A_{\pm 1}(\mathbf{n}) \quad (2.74)$$

È dunque sufficiente sostituire la 2.73 nella 2.74 per avere l'espressione seguente:

$$F_{\pm 1}(\mathbf{n}) = \pm \frac{i}{2} \sin \theta d_n \theta \mathbf{k} \times d_n \mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_0 \pm \frac{i}{2} (1 - \cos \theta) d_n \mathbf{k} \times d_n \mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_0 \quad (2.75)$$

Mostriamo ora che il secondo termine nel lato destro dell'equazione 2.75 è nullo. Dal momento che

$$d\mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = 0 \quad (2.76)$$

abbiamo

$$d\mathbf{k} = d\mathbf{k} \cdot \mathbf{k} \mathbf{k} = \mathbf{k} \times (d\mathbf{k} \times \mathbf{k}) \quad (2.77)$$

Di conseguenza

$$\begin{aligned} d\mathbf{k} \times d\mathbf{k} &= (\mathbf{k} \times (d\mathbf{k} \times \mathbf{k})) \times (\mathbf{k} \times (d\mathbf{k} \times \mathbf{k})) \\ &= \mathbf{k} \times (d\mathbf{k} \times \mathbf{k}) \cdot (d\mathbf{k} \times \mathbf{k}) \mathbf{k} - \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} \times (d\mathbf{k} \times \mathbf{k}) d\mathbf{k} \times \mathbf{k} \\ &= \mathbf{k} \times (d\mathbf{k} \times \mathbf{k}) \cdot (d\mathbf{k} \times \mathbf{k}) \mathbf{k} \end{aligned} \quad (2.78)$$

e poichè vale la 2.72, abbiamo inoltre

$$d\mathbf{k} \times d\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_0 = 0 \quad (2.79)$$

Sulla base del precedente risultato possiamo concludere il secondo termine della 2.75 sia nullo, per cui la curvatura sarà semplicemente

$$F_{\pm 1}(\mathbf{n}) = \pm \frac{i}{2} \sin \theta d_n \theta \mathbf{k} \times d_n \mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_0 \quad (2.80)$$

Per arrivare a ottenere le espressioni 2.66 e 2.67 necessitiamo tuttavia di ulteriori calcoli. Sfruttando la definizione 2.36, possiamo scrivere

$$\sin \theta d_n \theta = -d_n \cos \theta = -d_n (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0) = -d_n \cdot \mathbf{e}_0 \quad (2.81)$$

Tenendo conto della 2.37, avremo invece

$$d_n \mathbf{k} = d_n \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0}{|\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0|} = \frac{1}{|\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0|} \left(\mathbf{1} - \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0}{|\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0|} \otimes \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0}{|\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0|} \right) \cdot d\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0 \quad (2.82)$$

da cui

$$\begin{aligned} \mathbf{k} \times d_n \mathbf{k} &= \frac{1}{|\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0|^2} (\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0) \times (d\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0) \\ &= \frac{1}{|\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0|^2} (\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0 \cdot \mathbf{e}_0 d\mathbf{n} - \mathbf{n} \times \mathbf{e}_0 \cdot d\mathbf{n} \mathbf{e}_0) = \frac{\mathbf{n} \times d\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0}{1 - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0)^2} \mathbf{e}_0 \end{aligned} \quad (2.83)$$

Sostituendo questa espressione nella 2.73, abbiamo la relazione

$$A_{\pm 1}(\mathbf{n}) = \pm \frac{i}{2} \frac{(1 - \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0)}{1 - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0)^2} \mathbf{n} \times d\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0 = \pm \frac{i}{2} \frac{\mathbf{n} \times d\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0}{1 + \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0} \quad (2.84)$$

che coincide perfettamente con la 2.73.

Inserendo il risultato 2.83 nella 2.75, troviamo inoltre

$$F_{\pm 1}(\mathbf{n}) = \pm \frac{i}{2} d\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0 \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0 \cdot d\mathbf{n}}{|\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0|^2} \quad (2.85)$$

Poiché \mathbf{n} è un versore per ipotesi, esso gode delle seguenti proprietà:

$$\begin{aligned} \mathbf{n}^2 &= 1 \\ d\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} &= 0 \end{aligned} \quad (2.86)$$

Possiamo dunque scrivere

$$\begin{aligned} d\mathbf{n} \times d\mathbf{n} &= \mathbf{n} \cdot d\mathbf{n} \times d\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \\ &= \mathbf{n} \times ((d\mathbf{n} \times d\mathbf{n}) \times \mathbf{n}) \\ &= \mathbf{n} \times (d\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} d\mathbf{n} + d\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \mathbf{n}) = 0 \end{aligned} \quad (2.87)$$

Essendo vero che

$$d\mathbf{n} \times d\mathbf{n} = \mathbf{n} \cdot d\mathbf{n} \times d\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} \quad (2.88)$$

avremo

$$\begin{aligned} d\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0 \mathbf{n} \times \mathbf{e}_0 \cdot d\mathbf{n} &= d\mathbf{n} \cdot \frac{1}{2} (\mathbf{e}_0 \otimes \mathbf{n} \times \mathbf{e}_0 - \mathbf{n} \times \mathbf{e}_0 \otimes \mathbf{e}_0) d\mathbf{n} \\ &= \frac{1}{2} d\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0 \wedge \mathbf{n} \times \mathbf{e}_0 \cdot d\mathbf{n} = \frac{1}{2} d\mathbf{n} \cdot *(\mathbf{e}_0 \times (\mathbf{n} \times \mathbf{e}_0)) \cdot d\mathbf{n} \\ &= \frac{1}{2} d\mathbf{n} \cdot *(\mathbf{n} - \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_0) \cdot d\mathbf{n} = -\frac{1}{2} d\mathbf{n} \cdot (\mathbf{n} \times d\mathbf{n} - \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_0 \times d\mathbf{n}) \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{n} \cdot d\mathbf{n} \times d\mathbf{n} - \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_0 \cdot d\mathbf{n} \times d\mathbf{n}) = \frac{1}{2} (1 - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0)^2) \mathbf{n} \cdot d\mathbf{n} \times d\mathbf{n} \\ &= \frac{1}{2} |\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_0|^2 \mathbf{n} \cdot d\mathbf{n} \times d\mathbf{n} \end{aligned} \quad (2.89)$$

Sostituendo quest'ultima espressione nella 2.85, otteniamo finalmente

$$F_{\pm 1}(\mathbf{n}) = \pm \frac{i}{4} \mathbf{n} \cdot d\mathbf{n} \times d\mathbf{n} \quad (2.90)$$

che coincide con la relazione 2.67.

□

2.3 Osservazione sperimentale della fase di Berry per un singolo spin

La misura sperimentale della fase di Berry non prometteva di essere immediata, dal momento che il valore di aspettazione di ogni osservabile è indipendente dalla fase del sistema. Trattandosi di fasi, tuttavia, era chiaro ci si dovesse porre nelle condizioni di indagare un qualche tipo di interferenza.

Riportiamo di seguito la proposta originale di Berry, avanzata nel celebre articolo in cui esponeva la sua stessa teoria.

Si consideri un fascio monocromatico polarizzato di particelle nello stato di spin n , allineato nella direzione di un campo magnetico esterno \mathbf{B} . Si suggeriva di suddividere tale fascio in altri due: per il primo di questi il campo \mathbf{B} sarebbe stato mantenuto costante in modulo e direzione, mentre per il secondo, pur mantenendo la stessa intensità, \mathbf{B} sarebbe stato lentamente variato nella direzione lungo un circuito C , sottendente un angolo solido Ω .

In seguito i due fasci sarebbero stati ricombinati per interferire tra loro e ne sarebbe stata rilevata l'intensità in funzione di Ω .

Poiché la fase dinamica sarebbe stata la medesima per entrambi i fasci, ogni differenza di fase rilevata tra questi sarebbe stata dovuta unicamente alla presenza della fase di Berry. Nonostante l'esperimento sia concettualmente ineccepibile, risulta comunque difficilmente realizzabile, soprattutto a causa delle consistenti difficoltà che si incontrano nel garantire che la differenza tra le fasi dinamiche dei due fasci sia più esigua della fase di Berry che si cerca di misurare.

All'approccio proposto da Berry ne seguirono altri, più adatti alla realizzazione in laboratorio. Tra questi, l'esperimento di T. Bitter e D. Dubbers del 1987 permise di misurare la fase topologica dalla rotazione dello spin di neutroni polarizzati in un campo magnetico elicoidale.

L'assetto sperimentale è mostrato in figura 2.1 e vi si farà riferimento nella descrizione che segue.

I due fisici si servirono di un fascio monocromatico polarizzato di neutroni lenti, con velocità $v \simeq 500 \text{ ms}^{-1}$ e polarizzazione $P \simeq 0.97$ diretta perpendicolarmente rispetto all'asse z del fascio stesso. I neutroni venivano iniettati in un cilindro di Mu-metal coassiale al fascio con diametro 30 cm e lunghezza 80 cm, in cui le particelle attraversavano non adiabaticamente un campo magnetico \mathbf{B} con componenti longitudinale B_z e trasversale B_1 che subivano una rotazione destrorsa di 2π . La bobina che produceva il campo era avvolta sulla superficie del cilindro cavo e sulle sue aperture.

Al variare di B_z e B_1 , era possibile ottenere diversi valori dell'angolo solido Ω , sotteso al percorso descritto dalla variazione del vettore \mathbf{B} .

La polarizzazione del fascio veniva misurata dopo che questo aveva attraversato il cilindro

e da essa era poi possibile estrarre la fase di Berry.

Il confronto tra la differenza della fase di Berry misurata per gli stati di spin $S_z = -\frac{1}{2}$ e $S_z = \frac{1}{2}$ dei neutroni e dell'angolo solido Ω è mostrata in figura 2.1: l'osservazione sperimentale si dimostrò in buon accordo con le previsioni teoriche [10][12].

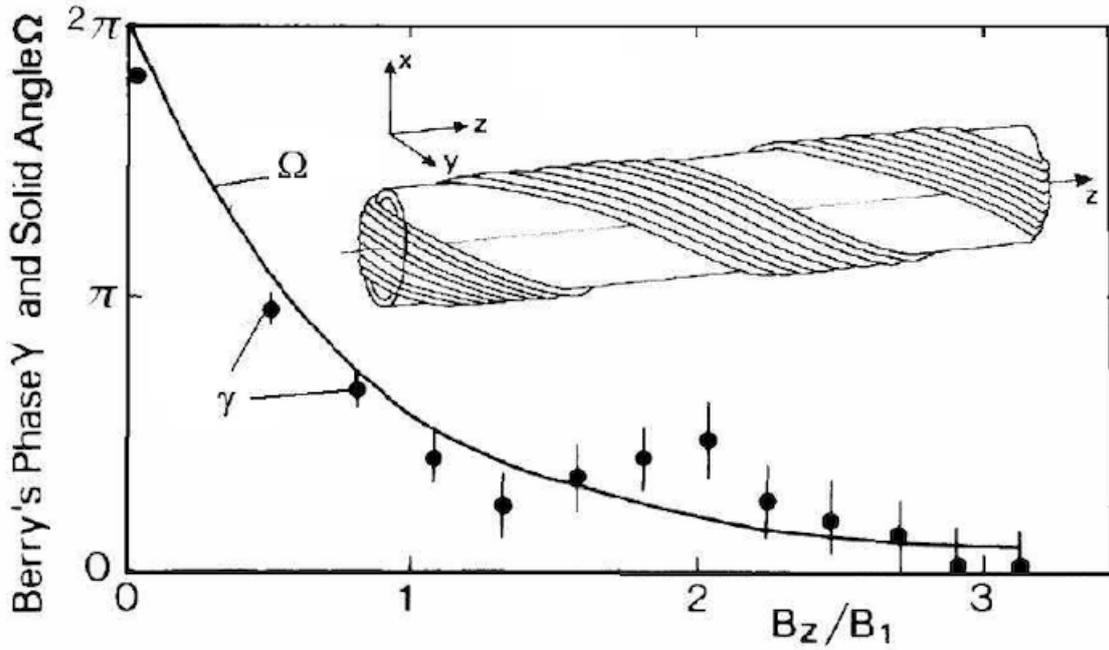


Figura 2.1: Misura della fase di Berry per i neutroni. L'immagine mostra l'avvolgimento della bobina sul cilindro che originava il campo magnetico elicoidale B_z , mentre è stato omesso quello che produceva il campo trasversale B_1 . Il fascio di neutroni era diretto lungo l'asse z . I punti del grafico mostrano la fase di Berry $\gamma = \gamma_{-1/2} - \gamma_{1/2}$ e la curva individua l'angolo solido Ω , entrambi in funzione del rapporto B_z/B_1 [10].

Appendice A

Trasporto parallelo e ologonomia

Al fine di definire l'ologonomia di una connessione su un certo spazio, è necessario introdurre il concetto di *trasporto parallelo* nel fibrato vettoriale \mathcal{L}_n sulla base Λ .

Nel seguito porremo $\mathcal{L}_n = E$ e assumeremo il fibrato sia di rango 1, per semplicità.

Per ogni curva parametrizzata

$$\gamma : [0, 1] \rightarrow \Lambda \quad (\text{A.1})$$

assegnamo una collezione di mappe lineari invertibile

$$T_\gamma(t, s) : E_{\gamma(s)} \rightarrow E_{\gamma(t)} \quad (\text{A.2})$$

dove $s, t \in [0, 1]$ e $T_\gamma(t, s)$ è una funzione differenziabile di t, s .

$T_\gamma(t, s)$ godrà inoltre delle seguenti proprietà:

$$\begin{aligned} T_\gamma(s, s) &= id_{E_{\gamma(s)}} \\ T_\gamma(t, u)T_\gamma(u, s) &= T_\gamma(t, s) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Per $\gamma(s), \gamma(t)$ appartenenti all'aperto \mathcal{U}_i , sottinsieme dello spazio Λ , si richiede valgano

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} T_{\gamma_i}(t, s) T_{\gamma_i}(t, s)^{-1} &= -\frac{d\gamma^\alpha(t)}{dt} A_{\alpha i}(\gamma(t)) \\ T_{\gamma_i}(s, s) &= id_{E_{\gamma(s)}} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

in cui A è una 1-forma definita in un intorno di $\gamma(t)$ indipendente dalla curva γ considerata. L'equazione A.4 deve essere risolta su ogni $\mathcal{U}_i \subseteq \Lambda$ tale che

$$E \Big|_{\mathcal{U}_i} \cong \mathcal{U}_i \times \mathbb{C} \quad (\text{A.5})$$

Passando da \mathcal{U}_i a \mathcal{U}_j , con \mathcal{U}_j altro aperto su Λ , in modo da garantire che $\gamma_{s,t} \subseteq \mathcal{U}_i \cap \mathcal{U}_j$, si avrà che

$$T_{\gamma_i}(t, s) \rightarrow e^{-i\phi_{ij}(\gamma(t))} T_{\gamma_j}(t, s) e^{+i\phi_{ij}(\gamma(s))} \quad (\text{A.6})$$

Se V è una sezione di E , avremo quindi che

$$V_i(\lambda) = e^{-i\phi_{ij}(\lambda)} V_j(\lambda) \quad (\text{A.7})$$

La proprietà A.6 di T_γ assicura che T_γ trasforma sezioni definite su γ in sezioni su γ .

Sia ora $\{\mathcal{U}_i\}$ un ricoprimento di Λ tale che

$$E|_{\mathcal{U}_i} \cong \mathcal{U}_i \times \mathbb{C} \quad (\text{A.8})$$

Supponiamo che l'intervallo $[0, 1]$ su cui la curva γ è parametrizzata secondo la A.1 sia suddiviso nei sottointervalli

$$t_0 = 0 \leq t \leq t_1, \quad t_1 \leq t \leq t_2, \quad \dots, \quad t_{p-1} \leq t \leq t_p = 1$$

tali che

$$\gamma(t) \in \mathcal{U}_i \quad (\text{A.9})$$

per $t_{i-1} \leq t \leq t_i$.

Possiamo allora integrare l'equazione A.4, ottenendo:

$$T_{\gamma_i}(t, s) = \exp\left(-\int_0^t d\tau \frac{d\gamma^\alpha}{dt}(\tau) A_{\alpha i}(\gamma(\tau))\right) = \exp\left(-\int_{\gamma_{st}} A_i\right) \quad (\text{A.10})$$

dove γ_{st} è il segmento di gamma che congiunge i punti s e t .

Sulla base del risultato A.10 e della A.6, riscriviamo la A.4:

$$\begin{aligned} -\frac{d\gamma^\alpha}{dt}(t) A_{\alpha i}(\gamma(t)) &= \frac{d}{dt} T_{\gamma_i}(t, s) T_{\gamma_i}(t, s)^{-1} \\ &= \frac{d}{dt} T_{\gamma_j}(t, s) T_{\gamma_j}(t, s)^{-1} - i \frac{d\gamma^\alpha}{dt} \frac{\partial}{\partial \lambda^\alpha} \phi_{ij}(\gamma(t)) \\ &= -\frac{d\gamma^\alpha}{dt}(t) \left[A_{\alpha j}(\gamma(t)) + i \frac{\partial}{\partial \lambda^\alpha} \phi_{ij}(\gamma(t)) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

da cui ricaviamo l'equazione

$$A_{\alpha i}(\gamma(t)) = A_{\alpha j}(\gamma(t)) + i \frac{\partial}{\partial \lambda^\alpha} \phi_{ij}(\gamma(t)) \quad (\text{A.12})$$

che possiamo riscrivere nel linguaggio delle forme differenziali attraverso la relazione 2.7:

$$A_i = A_j + id_\Lambda \phi_{ij} \quad (\text{A.13})$$

Calcoliamo il trasporto parallelo come

$$T_\gamma(1, 0) = \prod_{i=1}^p T_{\gamma_i}(t_i, t_{i-1}) \prod_{i=1}^{p-1} e^{-i\phi_{(i+1)i}(\gamma(t_i))} \quad (\text{A.14})$$

dove il secondo fattore si rende necessario affinché gli oggetti siano indipendenti dalla scelta degli \mathcal{U}_i intermedi tra l'intorno iniziale e quello finale.

Considerando una curva chiusa per cui

$$\gamma(0) = \gamma(1)$$

otteniamo dalla A.14 l'espressione della ologonomia su γ :

$$Hol_\gamma = \prod_{i=1}^p T_{\gamma_i}(t_i, t_{i-1}) \prod_{i=1}^p e^{-i\phi_{(i+1)i}(\gamma(t_i))} =: \exp\left(-\oint_\gamma A_n\right) \quad (\text{A.15})$$

dove abbiamo posto $\mathcal{U}_{p+1} = \mathcal{U}_1$.

La curvatura è una ologonomia su un percorso chiuso infinitesimale, infatti, impiegando il teorema di Stokes, dalla A.15 otteniamo

$$Hol_\gamma = \exp\left(-\oint_\gamma A_n\right) = \exp\left(-\int_\Delta F\right) \quad (\text{A.16})$$

in cui $\Delta \subseteq \Lambda$ è la superficie che ha per bordo γ .

L'integrale $\int_\Delta F$ è un integrale ben posto in quanto F è un 2-forma globalmente definita.

Bibliografia

- [1] **M. Born, V. Fock.** *Beweis des Adiabatsatzes.* In: *Zeitschrift für Physik*, 51 (1928), pp. 165-180
- [2] **A. Joye, C.E. Pfister.** *Quantum Adiabatic Evolution.* In: *On Three Levels vol.324* (1994), pp. 139-148
- [3] **J. W. Zwanziger, M. Koenig, A. Pines.** *Berry's Phase.* In: *Annu. Rev. Phys. Chern.* (1990), pp. 601-46
- [4] **D. J. Griffiths.** *Introduction to Quantum Mechanics.* (1995)
- [5] **M. Messiah.** *Quantum Mechanics.* (1961)
- [6] **C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe.** *Quantum Mechanics, Volume 1.* (1986)
- [7] **J.J. Sakurai, Jim Napolitano.** *Modern quantum mechanics.* (1994)
- [8] **J. Anandan.** *The geometric phase.* In: *Nature vol 360* (26 November 1992), p. 307.
- [9] **M. V. Berry.** *Quantal phase factors accompanying adiabatic changes.* In: *Proc. R: Lond. A392* (1984), pp. 45-57.
- [10] **P. Bruno.** *Berry phase effects in magnetism.* In: *Magnetism goes nano* (2005)
- [11] **R. Zucchini.** *Quantum Mechanics: Lecture Notes.*
- [12] **T. Bitters, D. Dubbers.** *Manifestation of Berry's Topological Phase in Neutron Spin Rotation.* In: *Physical Review Letters vol. 59* (20 July 1987), pp. 252-253.