

Topology in Condensed Matter Physics

Roberto Menta

26 novembre 2021

1 Barry phase

La meccanica quantistica ci dice che se conosco lo stato $|\psi\rangle$ di un sistema quantistico allora sono a conoscenza anche della sua evoluzione temporale $U(t) = e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}$ dove H è l'Hamiltoniana che descrive la dinamica del sistema. Possiamo quindi scrivere che

$$|\psi(\mathbf{r}, t)\rangle = e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}|\psi(\mathbf{r})\rangle$$

L'operatore di evoluzione temporale non contribuisce alla densità di probabilità ossia al modulo quadro dello stato. Di fatto è una fase detta *fase dinamica*.

Consideriamo una Hamiltoniana variabile temporalmente in modo adiabatico dipendente da $\mathbf{r}(t) = (r_1(t), r_2(t), \dots)$ e in generale da una serie di parametri esterni (flusso magnetico, campo elettrico, etc...). Consideriamo un cammino \mathcal{C} nello spazio dei parametri $r_i(t)$ i quali vengono variati lentamente con il tempo. Si introduce una base ortonormale *istantanea* $\{|n(\mathbf{r}(t))\rangle\}$ di autostati della Hamiltoniana $\mathcal{H}(\mathbf{r}(t))$:

$$\mathcal{H}(\mathbf{r})|n(\mathbf{r})\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{r})|n(\mathbf{r})\rangle.$$

Questa equazione determina gli stati di base $\{|n(\mathbf{r}(t))\rangle\}$ a meno di un fattore di fase. È noto infatti che un qualunque vettore nello spazio di Hilbert degli stati è detto *raggio* in poiché è definibile sempre a meno di un fattore $e^{i\alpha}$ ininfluente quando se ne fa il modulo quadro. Una possibile scelta per la fase è dettata dalla scelta di gauge. Possiamo richiedere che la fase di ogni vettore di base sia differenziabile e monodroma lungo il cammino \mathcal{C} .

Ammettiamo che il sistema quantistico sia inizialmente preparato in uno stato puro $|n(\mathbf{r}(0))\rangle$, autostato della Hamiltoniana istantanea $\mathcal{H}(\mathbf{r}(0))$. Ora, variamo lentamente $\mathbf{r}(t)$ lungo il cammino \mathcal{C} , lo stato iniziale evolverà con $\mathcal{H}(\mathbf{r})$ e instante per instante lo stato $|n(\mathbf{r}(t+dt))\rangle$ rimarrà autostato della Hamiltoniana allo stesso tempo $t+dt$. Questo risultato deriva dal teorema adiabatico della meccanica quantistica. La domanda che ci poniamo è: cosa succede alla fase? Ridefiniamo lo stato di base come

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-i\theta(t)}|n(\mathbf{r}(t))\rangle$$

La fase $\theta(t)$ non può far zero in quanto oltre all'ipotesi dell'esistenza di una ulteriore fase *geometrica*, deve contenere il contributo all'energia a cui è associato lo stato. Consideriamo l'evoluzione dinamica del sistema dettata dell'equazione di Schrödinger,

$$\mathcal{H}(\mathbf{r})|\psi_n(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi_n(t)\rangle$$

che in termini di $|n(\mathbf{r})\rangle$:

$$\varepsilon_n(\mathbf{r}(t))|n(\mathbf{r}(t))\rangle = \left(\hbar \dot{\theta}(t) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) |n(\mathbf{r}(t))\rangle.$$

Prendiamo adesso il prodotto scalare con il bra $\langle n(\mathbf{r}(t))|$ e assumiamo che il vettore di stato sia normalizzato ad 1. Si ottiene

$$\varepsilon_n(\mathbf{r}(t)) = \hbar \dot{\theta}(t) + i\hbar \langle n(\mathbf{r}(t))| \partial_t |n(\mathbf{r}(t))\rangle$$

da cui, risolvendo per $\theta(t)$ si ottiene

$$\theta(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t \varepsilon_n(\mathbf{r}(t')) dt' - i \int_0^t \langle n(\mathbf{r}(t')) | \partial_{t'} | n(\mathbf{r}(t')) \rangle dt'$$

dove il primo contributo è la conosciuta *fase dinamica* mentre (meno) il secondo contributo è la *fase di Berry*. In maniera più compatta abbiamo ottenuto che

$$|\psi_n(t)\rangle = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \varepsilon_n(\mathbf{r}(t')) dt' \right] \exp(i\gamma_n) |n(\mathbf{r}(t))\rangle$$

dove γ_n è la *Berry phase*,

$$\gamma_n = i \int_0^t \langle n(\mathbf{r}(t')) | \partial_{t'} | n(\mathbf{r}(t')) \rangle dt'$$

Questo contributo di fase discende dal fatto che gli stati al tempo t e al tempo $t + dt$ non sono identici. Possiamo rimuovere la dipendenza dal tempo dall'espressione precedente. Consideriamo il cammino nello spazio dei parametri \mathcal{C} , la fine del cammino corrisponde al tempo \tilde{t} . Si ha che

$$\gamma_n = i \int_0^{\tilde{t}} \langle n(\mathbf{r}(t')) | \nabla_{\mathbf{r}} | n(\mathbf{r}(t')) \rangle \frac{d\mathbf{r}}{dt'} dt'$$

da cui

$$\boxed{\gamma_n = i \int_{\mathcal{C}} \langle n(\mathbf{r}) | \nabla_{\mathbf{r}} | n(\mathbf{r}) \rangle d\mathbf{r}}$$

In analogia con il trasporto elettrico in un campo elettromagnetico possiamo definire la *connessione di Berry* (detto anche potenziale vettore di Berry),

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{r}) = i \langle n(\mathbf{r}) | \nabla_{\mathbf{r}} | n(\mathbf{r}) \rangle, \quad \gamma_n = \int_{\mathcal{C}} \mathbf{A}_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

La fase di Berry è reale infatti

$$\gamma_n^* = -i \int_{\mathcal{C}} -\langle n(\mathbf{r}) | \nabla_{\mathbf{r}} | n(\mathbf{r}) \rangle d\mathbf{r} = \gamma_n$$

avendo usato che $\langle n(\mathbf{r}) | \nabla_{\mathbf{r}} | n(\mathbf{r}) \rangle = -\langle n(\mathbf{r}) | \nabla_{\mathbf{r}} | n(\mathbf{r}) \rangle^*$. La i davanti all'integrale rende reale la fase di Berry in quanto anche l'argomento dell'integrale è immaginario. Il fatto che $\gamma_n \in \mathbb{R}$ significa che la fase di Berry non caratterizza un decadimento.

$$\gamma_n = -\Im \int_{\mathcal{C}} \langle n(\mathbf{r}) | \nabla_{\mathbf{r}} | n(\mathbf{r}) \rangle d\mathbf{r}.$$

La connessione di Berry $\mathbf{A}_n(t)$ è dipendente dalla scelta di gauge che facciamo. Consideriamo, per esempio, la trasformazione $|n(\mathbf{r})\rangle \rightarrow e^{i\Lambda(\mathbf{r})} |n(\mathbf{r})\rangle$ dove $\Lambda(\mathbf{r})$ è una funzione differenziabile infinite volte e a singolo valore. Allora, il potenziale vettore trasforma come ($\langle n(\mathbf{r}) | \rightarrow e^{-i\Lambda(\mathbf{r})} \langle n(\mathbf{r}) |$) :

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_n(\mathbf{r}) &\rightarrow ie^{-i\Lambda(\mathbf{r})} \left(\langle n(\mathbf{r}) | i\nabla_{\mathbf{r}} \Lambda(\mathbf{r}) e^{i\Lambda(\mathbf{r})} | n(\mathbf{r}) \rangle + \langle n(\mathbf{r}) | e^{i\Lambda(\mathbf{r})} \nabla_{\mathbf{r}} | n(\mathbf{r}) \rangle \right) \\ &= \mathbf{A}_n(\mathbf{r}) - \nabla_{\mathbf{r}} \Lambda(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Ossia trasforma come ci si aspetta per trasformazioni di gauge. Una conseguenza della buona trasformabilità sotto il gruppo di gauge è che la fase di Berry cambia in un periodo \tilde{t} infatti

$$\Delta\gamma_n = - \int_{\mathcal{C}} \nabla_{\mathbf{r}} \Lambda(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \Lambda(\mathbf{r}(0)) - \Lambda(\mathbf{r}(\tilde{t})).$$

Dopo la rivoluzionaria scoperta di Berry, molti fisici pensavano che attraverso una scelta appropriata di gauge sarebbe stato possibile eliminare la fase γ_n . In realtà non è così. La fase di Berry ha una natura geometrico-fondamentale e non è eliminabile per scelta di gauge.

Consideriamo un cammino chiuso \mathcal{K} , ciò significa che $\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}(\tilde{t})$. Questo significa che dopo un tempo pari al periodo \tilde{t} , la base di autostati della Hamiltoniana \mathcal{H} torna ad essere la stessa ossia $|n(\mathbf{r}(0))\rangle = |n(\mathbf{r}(\tilde{t}))\rangle$. Quest'ultima condizione è invariante sotto trasformazioni di gauge :

$$e^{i\Lambda(\mathbf{r}(0))}|n(\mathbf{r}(0))\rangle = e^{i\Lambda(\mathbf{r}(\tilde{t}))}|n(\mathbf{r}(\tilde{t}))\rangle = e^{i\Lambda(\mathbf{r}(0))}|n(\mathbf{r}(\tilde{t}))\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\Lambda(\mathbf{r}(\tilde{t})) - \Lambda(\mathbf{r}(0)) = 2\pi m, \quad m \in \mathbb{Z}}$$

La fase di Berry non può essere cancellata in una evoluzione adiabatica lungo un percorso \mathcal{K} chiuso nello spazio dei parametri ! L'unico modo per cancellare la fase è che la differenza sia multiplo intero di 2π . Dunque, in generale, la fase di Berry è eliminabile se consideriamo cammini \mathcal{C} non chiusi, è invece di natura fondamentale, *invariante di gauge* e indipendente dalla dipendenza temporale dei parametri $\mathbf{r}(t)$, se consideriamo cammini chiusi \mathcal{K} .

$$\gamma_n = \oint_{\mathcal{K}} \mathbf{A}_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

In quest'ultimo caso possiamo utilizzare il teorema di Stokes :

$$\begin{aligned} \gamma_n &= -\Im \oint_{\mathcal{K}} d\mathbf{r} \langle n(\mathbf{r}) | \nabla | n(\mathbf{r}) \rangle = -\Im \oint_{\mathcal{K}\mathcal{K}} d\mathbf{S} \cdot (\nabla \wedge \langle n(\mathbf{r}) | \nabla | n(\mathbf{r}) \rangle) \\ &= -\Im \oint_{\mathcal{K}\mathcal{K}} dS_i \epsilon^{ijk} \nabla_j \langle n(\mathbf{r}) | \nabla_k | n(\mathbf{r}) \rangle \\ &= -\Im \oint_{\mathcal{K}\mathcal{K}} d\mathbf{S} \cdot (\langle \nabla n(\mathbf{r}) | \wedge | \nabla n(\mathbf{r}) \rangle) \end{aligned}$$

dove $\mathcal{K} = \partial\mathcal{K}\mathcal{K}$ e $\langle \nabla n(\mathbf{r}) | \wedge | \nabla n(\mathbf{r}) \rangle$ è la *curvatura di Berry*. In particolare

$$F_{jk} = \langle \nabla_j n(\mathbf{r}) | \nabla_k n(\mathbf{r}) \rangle - \langle \nabla_k n(\mathbf{r}) | \nabla_j n(\mathbf{r}) \rangle$$

è la curvatura di Berry, in analogia con il campo magnetico (rotore del potenziale vettore).