

# Семинар 6. Адиабатическое приближение.

Антоненко Даниил

15 октября 2016

## Нестационарное адиабатическое приближение

Рассмотрим *мгновенные* собственные состояния гамильтониана, зависящего от параметра (время рассматривается как параметр):

$$\hat{H}(t) |\psi_n(t)\rangle = E_n(t) |\psi_n(t)\rangle. \quad (1)$$

Легко видеть, что они, вообще говоря, НЕ являются решениями нестационарного уравнения Шредингера. От времени зависит не только энергия, но и собственный вектор, причём предполагается, что эта зависимость гладкая, а состояния  $|\psi_n(t)\rangle$  ортонормированы. Разложим произвольный вектор состояния по этим состояниям, вынеся *динамический фазовый множитель*  $\exp(-i \int dt E(t))$ , являющийся обобщением обычного фазового множителя:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\psi_n(t)\rangle \exp\left(-i \int_0^t dt' E_n(t')\right).$$

Если бы гамильтониан не зависел от времени, то  $\exp(-i \int dt E(t))$  являлись бы решениями уравнения Шредингера и коэффициенты  $c_n(t)$  не зависели бы от времени. Найдём, как они зависят от времени в нашей нестационарной задаче:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \sum_n \dot{c}_n(t) |\psi_n(t)\rangle \exp\left(-i \int_0^t dt' E_n(t')\right) + \sum_n c_n(t) |\dot{\psi}_n(t)\rangle \exp\left(-i \int_0^t dt' E_n(t')\right) \\ &\quad - i \sum_n E_n(t) c_n(t) |\psi_n(t)\rangle \exp\left(-i \int_0^t dt' E_n(t')\right). \end{aligned}$$

С другой стороны,  $|\psi(t)\rangle$  (в отличие от  $|\psi_n(t)\rangle$ !) удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -i \hat{H} |\psi(t)\rangle.$$

Умножим скалярно слева на  $\langle \psi_k(t) |$ :

$$\langle \psi_k(t) | -i \hat{H} |\psi(t)\rangle = \dot{c}_k(t) \exp\left(-i \int_0^t dt' E_k(t')\right) + \sum_n c_n(t) \langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle \exp\left(-i \int_0^t dt' E_n(t')\right) - i E_k(t) c_k(t) \exp\left(-i \int_0^t dt' E_k(t')\right).$$

Подействовав гамильтонианом налево, получим  $-i E_k \langle \psi_k(t) | \psi(t) \rangle = -i E_k c_k(t) \exp\left(-i \int_0^t dt' E_k(t')\right)$ :

$$\begin{aligned} -i E_k c_k(t) \exp\left(-i \int_0^t dt' E_k(t')\right) &= \dot{c}_k(t) \exp\left(-i \int_0^t dt' E_k(t')\right) + \sum_n c_n(t) \langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle \exp\left(-i \int_0^t dt' E_n(t')\right) \\ &\quad - i E_k(t) c_k(t) \exp\left(-i \int_0^t dt' E_k(t')\right). \end{aligned}$$

Откуда получим:

$$\dot{c}_k(t) = - \sum_n c_n(t) \langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle \exp\left(-i \int_0^t dt' [E_n(t') - E_k(t')]\right).$$

(2)

## Вычисление $\langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle$ (случай без спиновой структуры)

Заметим, что величина  $\langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_k(t) \rangle$  чисто мнимая. Действительно:

$$\langle \psi_k(t) | \psi_k(t) \rangle = 1 \Rightarrow \langle \dot{\psi}_k(t) | \psi_k(t) \rangle + \langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_k(t) \rangle = 0 = \langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_k(t) \rangle^\dagger + \langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_k(t) \rangle = 2\text{Re} \langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_k(t) \rangle$$

Если  $|\psi_n(t)\rangle$  описывается волновой функцией, имеющей только координатную зависимость (без спиновой структуры), то можно выбрать вещественные решение стационарного уравнения Шредингера  $\psi_k(x)$ . Тогда  $\langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_k(t) \rangle$  будет чисто вещественной и, следовательно, нулевой.

Найдём  $\langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle$ , продифференцировав (1) по времени:

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} |\psi_n\rangle + \hat{H} \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n\rangle = \dot{E}_n |\psi_n\rangle + E_n \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n\rangle. \quad (3)$$

Домножая на  $\langle \psi_k |$ , получим

$$\langle \psi_k | \dot{\psi}_n \rangle = \frac{\langle \psi_k | \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} | \psi_n \rangle}{E_n - E_k}.$$

## 0-ой и первый порядки. Адиабатическая теорема.

Будем решать уравнение (2) итерациями, рассматривая правую часть, как возмущение. Параметр разложения определим, сравнив первый порядок с нулевым. В нулевом порядке

$$c_k^{(0)}(t) = c_k(0).$$

В первом порядке (как говорилось выше, пока будем считать, что  $\langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_k(t) \rangle = 0$ ):

$$c_k^{(1)}(t) = \sum_{n \neq k} \int_0^t dt' c_n(0) \frac{\langle \psi_k | \frac{\partial \hat{H}(t')}{\partial t} | \psi_n \rangle}{E_k - E_n} \exp \left( -i \int_0^{t'} dt'' [E_n(t'') - E_k(t'')] \right).$$

Оценим  $n$ -ый член, считая, что энергии  $E_n$  и  $E_k$  меняются мало по сравнению с  $|E_n - E_k|$ , оценив экспоненту, как  $e^{i(E_k - E_n)t'}$ . Эта экспонента будет обрезать интеграл по  $t'$  на масштабе  $1/(E_n - E_k)$ . Оценим подынтегральное выражение его значением при  $t' = 0$ . Тогда

$$c_k^{(1)} \sim \sum_{n \neq k} c_n(0) \frac{\langle \psi_k | \frac{\partial \hat{H}(t')}{\partial t} | \psi_n \rangle}{|E_k - E_n|^2} \sim \sum_{n \neq k} c_n(0) \frac{\partial H}{\partial t} \frac{\hbar}{|E_k - E_n|} \frac{1}{|E_k - E_n|}.$$

Таким образом, условие применимости адиабатического приближения заключается в том, что матричные элементы гамильтониана меняются мало за время  $\hbar/(|E_k - E_n|)$  по сравнению с  $1/|E_n - E_k|$ :

$$\left| \frac{\partial H}{\partial t} \right| \frac{\hbar}{|E_k - E_n|} \frac{1}{|E_k - E_n|} \ll 1.$$

Обратите внимание, на то, что осциллирующий фазовый множитель противодействует переходам на другие уровни. Благодаря нему интеграл не расходится со временем, как можно было бы думать априори. В пределе бесконечно медленного изменения гамильтониана переходы отсутствуют, что является содержанием *адиабатической теоремы*<sup>2</sup>.

При сближении уровней вероятность перехода возрастает. Типичное поведение гамильтониана вблизи точки максимального сближения уровней (щель  $\Delta$ ) есть  $\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \alpha t & \Delta \\ \Delta & -\alpha t \end{pmatrix}$ . Такая задача носит название задачи Ландау-Зенера и имеет решение для вероятности перехода  $w \sim e^{-\pi \Delta^2 / \alpha}$ .

<sup>1</sup>Если переписать это условие на языке частот  $\omega_k = E_k/\hbar$ , то в ответ не войдет  $\hbar$ . При рассмотрении адиабатических инвариантов в классической механике получается схожее условие применимости!

<sup>2</sup>Интересно проследить связь с адиабатическим инвариантом в классической механике  $I = 1/(2\pi) \oint p dq$ . В случае применимости квазиклассического приближения, номер уровня определяется правилами квантования Бора-Зоммерфельда  $\oint p dq = 2\pi\hbar(n + 1/2)$ . Таким образом, величины  $I$  и  $n$  совпадают с точностью до множителя, а сохранение номера уровня в квантовой механике переходит в сохранение адиабатического инварианта в классической.

## Стационарное адиабатическое приближение

Адиабатическое приближение применимо в стационарных задачах в том случае, когда система разделяется на быструю (координаты  $x$ ) и медленную (координаты  $\xi$ ) подсистемы<sup>3</sup>. Пусть гамильтониан представим в виде

$$\mathcal{H} = H_1(x) + H_2(\xi) + V(x, \xi).$$

Рассмотрим  $\xi$  как параметр при решении стационарной задачи для быстрой подсистемы:

$$[H_1(x) + V(x, \xi)] u_n(x, \xi) = \epsilon_n(\xi) u_n(x, \xi).$$

Так как  $\xi$  «меняется медленно», то уровень  $n$  быстрой подсистемы будет сохраняться. Говоря формально, можно искать решение задачи в виде:

$$\psi_{n,k} = \phi_{n,k}(\xi) u_n(x, \xi).$$

В адиабатическом приближении можно получить уравнение на  $\phi$ , которое содержит эффективную потенциальную энергию, равную энергии быстрой подсистемы при заданном  $\xi$ .

$$[H_2(\xi) + \epsilon_n(\xi)] \phi_{n,k}(\xi) = E_{n,k} \phi_{n,k}(\xi),$$

где  $E_{n,k}$  будут уровнями энергии в исходной задаче, которые параметризуются квантовыми числами  $k$  и  $n$  быстрой и медленной подсистемы, соответственно.

### Пример

Типичный пример – движение частицы в двумерной яме с бесконечно высокими стенками, имеющими форму эллипсоида ( $b \gg a$ ):

$$U(x, y) = \begin{cases} 0, & \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} < 1, \\ \infty, & \text{иначе.} \end{cases}$$

В данном случае  $x$  – быстрая переменная, а  $y$  – медленная (как мы увидим, кинетическая энергия, отвечающая движению по  $x$  гораздо больше кинетической энергии движения по  $y$ ). Сначала решим задачу при фиксированном  $y$ . Она представляет собой задачу о движении частицы в одномерном бесконечно высоком потенциальном ящике ширины  $L = 2a\sqrt{1 - y^2/b^2}$ . Уровни энергии суть  $\epsilon_n = \pi^2 n^2 / (2mL^2)$ . Тогда эффективный гамильтониан движения в  $y$ -направлении будет

$$H_{\text{eff}} = \frac{p_y^2}{2m} + \frac{\pi^2 n^2}{8ma^2} \frac{1}{1 - y^2/b^2}.$$

Оказывается, что если искать низкоэнергетические уровни энергии, то законно разложить потенциал по  $y$  до второго порядка, сводя задачу к гармоническому осциллятору:

$$H_{\text{eff}} \approx \frac{p_y^2}{2m} + \frac{\pi^2 n^2}{8ma^2} + \frac{\pi^2 n^2}{8ma^2} \frac{y^2}{b^2},$$

$$E_{k,n} = \frac{\pi^2 n^2}{8ma^2} + \frac{\pi n}{2mab} \left( k + \frac{1}{2} \right).$$

Для проверки корректности этого приближения нужно необходимо, чтобы характерный размер  $y_0 \sim \sqrt{ab}$  волновой функции  $\psi \sim \exp(-y^2/2y_0^2)$  был много меньше  $b$ , что выполняется при нашем приближении  $a \ll b$ .

*Примечание:* имеется классический аналог этой задачи, в которой частица совершает быстрые колебательные движения по оси  $x$ , отражаясь от стенок и медленно осциллирует в  $y$ -направлении.

<sup>3</sup>В качестве подсистем могут выступать в том числе и, скажем, координаты  $x$  и  $y$  одной и той же частицы.

## Уравнение Фейнмана-Геллмана

Обратимся теперь к случаю нетривиальной спиновой структуры. Уравнение (3) в этом случае не даст выражения для  $\langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_k(t) \rangle$ . Оно имеет вид:

$$\dot{E}_k = \left\langle \psi_k \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right| \psi_k \right\rangle.$$

Это уравнение будет верно и для дифференцирования по произвольному параметру  $\lambda$ :

$$\frac{\partial E_k}{\partial \lambda} = \left\langle \psi_k \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right| \psi_k \right\rangle.$$

Оно называется уравнением Фейнмана-Геллмана.

## Фаза Берри

Итак, для случая нетривиальной спиновой структуры  $\langle \psi_k(t) | \dot{\psi}_k(t) \rangle$  может отличаться от нуля. Эта чисто мнимая величина приводит к тому, что при адиабатической эволюции состояния помимо обычной динамической фазы  $\exp(-i \int dt E(t))$  возникает дополнительный фазовый множитель носящий имя *фазы Берри*:

$$\gamma = i \int_0^t \left\langle \psi \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \psi \right\rangle dt.$$

Несмотря на кажущуюся маловажность этого множителя, он приводит к ряду крайне интересных и нетривиальных физических явлений.

Пусть гамильтониан зависит от времени посредством параметров  $\lambda(t)$ :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\lambda(t)).$$

Тогда, выполнив замену переменных, можно записать фазу Берри в виде, который показывает, что она зависит только от пути в пространстве параметров, но никак не от скорости прохождения этого пути:

$$\gamma = i \int_C \langle \psi_n(\lambda) | \nabla_\lambda | \psi_n(\lambda) \rangle d\lambda.$$

Можно ввести так называемую *связность Берри*  $\mathbf{A}(\lambda)$ :

$$\gamma = i \int_C \mathbf{A} d\lambda, \quad \mathbf{A} = \langle \psi_n(\lambda) | \nabla_\lambda | \psi_n(\lambda) \rangle.$$

Ее свойства во многом аналогичны вектор-потенциалу в электродинамике<sup>4</sup>. В частности, можно воспользоваться теоремой Стокса и записать интеграл по замкнутому контуру через интеграл от ротора<sup>5</sup> по поверхности в пространстве  $\lambda$ , натянутой на этот контур. Рассмотрим систему со спином в магнитном поле:  $\mathcal{H} = -\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$ , роль  $\lambda$  выполняет  $\mathbf{B}$ . Тогда

$$\gamma = i \int dS_\lambda \text{rot} \mathbf{A} = i \int dS_\lambda \nabla \times \langle \psi_n | \nabla | \psi_n \rangle = i \int dS_\lambda \langle \nabla \psi | \times | \nabla \psi \rangle.$$

Величина  $\langle \nabla \psi | \times | \nabla \psi \rangle$  носит название *кривизны Берри*. Ее свойства аналогичны напряжённости поля в электродинамике и тензору кривизны в общей теории относительности.

Для рассматриваемой системы кривизна Берри  $\text{rot} \mathbf{A} = \langle \nabla \psi | \times | \nabla \psi \rangle$  меняется в пространстве параметров  $\mathbf{B}$  по такому же закону, как и магнитное поле, создаваемое магнитным монополем, расположенным в начале координат. На языке спина начало координат отвечает нулевой  $\mathbf{B}$ , при этом возникает вырождение уровней и приведённые рассуждения становятся некорректными.

<sup>4</sup>а также связности (символам Кристоффеля) в общей теории относительности.

<sup>5</sup>или его обобщения в задачах произвольной размерности.