2. Landau - Zener - Übergänge

Hamilton-Op. $H(\vec{\lambda})$, $\vec{\lambda}$ adiabatische Variable
$\vec{\lambda} = \vec{\lambda}(t)$

Instantane stat. SGL

$$H(\vec{\lambda})\,|\psi(\vec{\lambda})\rangle = E_n(\vec{\lambda})\,|\psi(\vec{\lambda})\rangle$$

instantane EV

instantaner Eigenwert

Betrachte unitäre Trafo

$$U(\vec{\lambda}_0, \vec{\lambda}) = \sum_n |\psi_n(\vec{\lambda}_0)\rangle\langle\psi_n(\vec{\lambda})| \quad \text{mit } \vec{\lambda}_0 = \vec{\lambda}(t=t_0)$$

Es ist $U(\vec{\lambda}_0, \vec{\lambda})^{-1} = U(\vec{\lambda}_0, \vec{\lambda})^{+} = U(\vec{\lambda}, \vec{\lambda}_0)$

$$U(\vec{\lambda}_0, \vec{\lambda}_0) = \sum |\psi_n(\vec{\lambda}_0)\rangle\langle\psi_n(\vec{\lambda}_0)| = 1$$

Betrachte Zustand

$$|\phi(t)\rangle = U(\vec{\lambda}_0, \underbrace{\vec{\lambda}}_{\vec{\lambda}(t)})\,|\psi(t)\rangle$$

$$|\phi(t)\rangle = \sum_n |\psi_n(\vec{\lambda}_0)\rangle \underbrace{\langle\psi_n(\vec{\lambda})\,|\,\psi(t)\rangle}_{\alpha_{n\vec{\lambda}}(t)}$$

$$= \sum_n \alpha_{n\vec{\lambda}}(t)\,|\psi_n(\vec{\lambda}_0)\rangle$$

Zeitentwicklung

$$i\hbar\,\partial_t\,|\phi(t)\rangle =$$

$$\underbrace{\left[i\hbar\,\partial_t U(\vec{\lambda}_0, \vec{\lambda})\right]}_{i\hbar\,\dot{\vec{\lambda}}(t)\,\vec{\nabla}_\lambda U(\vec{\lambda}_0, \vec{\lambda})}|\psi(t)\rangle + i\hbar\, U(\vec{\lambda}_0, \vec{\lambda}(t))\underbrace{\partial_t|\psi(t)\rangle}_{=\,H(\vec{\lambda})\,|\psi(t)\rangle}$$

$$= \left\{ i\hbar\,\dot{\vec{\lambda}}\,\vec{\nabla}_\lambda U(\vec{\lambda}_0, \vec{\lambda}) + U(\vec{\lambda}_0, \vec{\lambda})\,H(\vec{\lambda}) \right\} |\psi(t)\rangle$$

$$U(\vec{\lambda}, \vec{\lambda}_0)\,U(\vec{\lambda}_0, \vec{\lambda}) = 1$$

$$= \Big\{ \underbrace{i\hbar \dot{\vec{\lambda}} \left[\vec{\nabla}_\lambda U(\vec{\lambda}_0, \vec{\lambda}) \right] U(\vec{\lambda}, \vec{\lambda}_0) + U(\vec{\lambda}_0, \vec{\lambda}) H(\vec{\lambda}) U(\vec{\lambda}, \vec{\lambda}_0)}_{= \tilde{H}(\vec{\lambda}(t)) \text{ effekt. Hamilton}} \; |\phi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow \; i\hbar \partial_t |\phi\rangle = \tilde{H} |\phi\rangle$$

$$\tilde{H}(\vec{\lambda}(t)) = -i\hbar \dot{\vec{\lambda}} \, U(\vec{\lambda}_0, \vec{\lambda}) \vec{\nabla}_\lambda U(\vec{\lambda}, \vec{\lambda}_0)$$
$$+ \underbrace{U(\vec{\lambda}_0, \vec{\lambda}) H(\vec{\lambda}) U(\vec{\lambda}, \vec{\lambda}_0)}_{U H U^{-1}}$$

U einsetzen, $\Rightarrow$ Doppelsumme

1. Diagonale Terme

$$U(\vec{\lambda}_0, \lambda) H(\vec{\lambda}) U(\vec{\lambda}, \vec{\lambda}_0) =$$

zweite Term
$$\sum_{n,m} |\psi_n(\vec{\lambda}_0)\rangle \underbrace{\langle \psi_n(\vec{\lambda})| H(\vec{\lambda}) | \psi_m(\vec{\lambda})\rangle}_{\delta_{nm} E_n(\vec{\lambda})} \langle \psi_m(\vec{\lambda}_0)|$$

$$\Rightarrow \; = \sum_n |\psi_n(\vec{\lambda}_0)\rangle\langle \psi_n(\vec{\lambda}_0)| \; E_n(\vec{\lambda})$$

erster Term
$$-i\hbar \dot{\vec{\lambda}} \sum_{n,m} |\psi_n(\vec{\lambda}_0)\rangle\langle \psi_n(\vec{\lambda})| \vec{\nabla}_\lambda \psi_m(\vec{\lambda})\rangle\langle \psi_m(\vec{\lambda}_0)|$$

diagonale Beitrag
$$-i\hbar \dot{\vec{\lambda}} \sum_n |\psi_n(\vec{\lambda}_0)\rangle\langle \psi_n(\vec{\lambda})| \vec{\nabla}_\lambda \psi_n(\vec{\lambda})\rangle\langle \psi_n(\vec{\lambda})|$$

$$= -\hbar \dot{\vec{\lambda}} \sum_n |\psi_n(\vec{\lambda}_0)\rangle\langle \psi_n(\vec{\lambda}_0)| \cdot \vec{C}_n(\vec{\lambda})$$

Die diagonalen Beiträge ergeben

$$\tilde{H}_{diag}(\vec{\lambda}) = \sum_n |\psi_n(\vec{\lambda}_0)\rangle\langle \psi_n(\vec{\lambda}_0)| \left\{ E_n(\vec{\lambda}) - \hbar \dot{\vec{\lambda}} \vec{C}_n(\vec{\lambda}) \right\}$$

Die diagonalen Terme erhalten die Quantenzahl n und führen mit der Anfangsbed. $|\phi(t_0)\rangle = |\psi_n(\vec{\lambda}_0)\rangle$

zu $$|\phi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} E_n(\vec{\lambda}(t'))\,dt'\right) \exp\left(\int_{\vec{\lambda}_0}^{\vec{\lambda}} C_n(\vec{\lambda})\,d\vec{\lambda}\right) |\psi_n(\vec{\lambda}_0)\rangle$$

dyn. Phase

Berry Phase

2. nichtdiagonale Terme

$$V(t) = -i\hbar\,\dot{\vec{\lambda}} \sum_{n \neq m} |\psi_n(\vec{\lambda}_0)\rangle\langle\psi_m(\vec{\lambda}_0)|\,\langle\psi_n(\vec{\lambda})|\vec{\nabla}_{\lambda}\,\psi_m(\vec{\lambda})\rangle$$

Betrachte $H(\vec{\lambda}(t)) = H_0(t) + V(t)$

diagonale Terme

Störungstheorie, Übergang ins Wechselwirkungsbild

$$|\phi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H_0(t')\,dt'\right)|\phi_I(t)\rangle$$

$$V_I(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H_0(t')\,dt'\right) V(t)\, \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H_0(t')\,dt'\right)$$

Bem: $[H_0(t), H_0(t')] = 0$

$$i\hbar\,\partial_t|\phi_I(t)\rangle = V_I(t)|\phi_I(t)\rangle$$

Übergangswahrscheinlichkeit

$$P_{f\leftarrow i} \approx \left|\langle\psi_f(\vec{\lambda}_0)|\,U_I(t,t_i)\,|\psi_i(\vec{\lambda}_0)\rangle\right|^2$$

$$|\phi_I(t)\rangle = U_I(t,t_0)\,|\phi_I(t_0)\rangle$$

$$U_I(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t')\,U_I(t',t_0)\,dt' + \ldots$$

$\langle\phi|U|\phi\rangle = 0$ wg. $f \neq i$ und Orthogonalität

$$P_{f\leftarrow i} = \left|\int_{t_i}^{t} \dot{\vec{\lambda}}(t')\langle\psi_f(\vec{\lambda}(t'))|\vec{\nabla}_{\lambda}\psi_i(\vec{\lambda}(t'))\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t'}\left[E_i(\vec{\lambda}(t''))-E_f(\vec{\lambda}(t''))\right]dt''\right) \cdot \exp\left(i\int_{\vec{\lambda}_i}^{\vec{\lambda}}\left[\vec{C}_i(\vec{\lambda}'')-\vec{C}_f(\vec{\lambda}'')\right]d\vec{\lambda}''\right)dt'\right|^2$$

Zur Zeit $t = t_0$: $|\psi_i(\lambda(t_i))\rangle$

Beispiel

$$H(\vec{\lambda}) = -\frac{1}{2}\left(\lambda(t)\,\sigma_z + \Delta\,\sigma_x\right)$$

$$\lambda(t) = \alpha \cdot t \qquad , \ \alpha \text{ hinreichend klein}$$

λ kann bel. groß werden, aber $\dot{\lambda}$ bleibt klein

instantane EWe und EVen

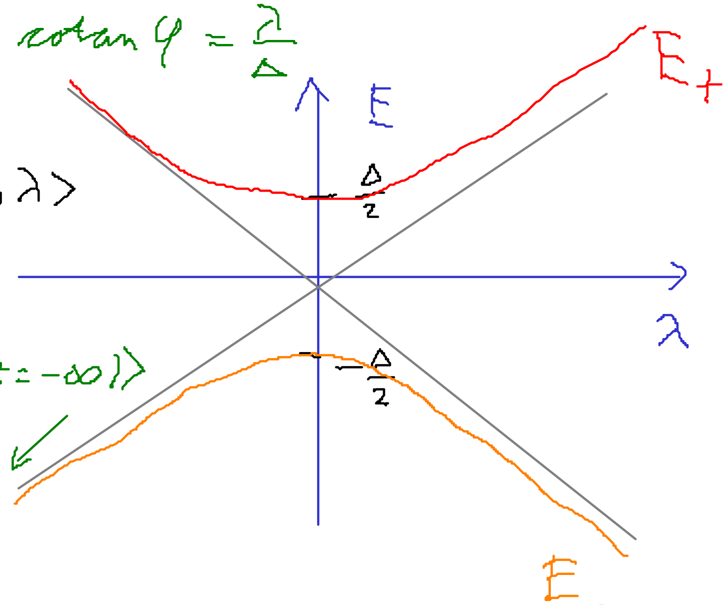
$$E_\pm = \pm\frac{1}{2}\sqrt{\lambda^2+\Delta^2}$$

$$|+,\lambda\rangle = -\sin\frac{\varphi}{2}\,|\uparrow\rangle + \cos\frac{\varphi}{2}\,|\downarrow\rangle$$

$$|-,\lambda\rangle = \cos\frac{\varphi}{2}\,|\uparrow\rangle + \sin\frac{\varphi}{2}\,|\downarrow\rangle$$

$$\cot\varphi = \frac{\lambda}{\Delta}$$

Für $t \to -\infty$ sei das System im Zustand $|-,\lambda\rangle$



Es gibt Wahrscheinlichkeit, dass Zustand von $|-,\lambda\rangle$ nach $|+,\lambda\rangle$ springt.

$t_i = -\infty$, $t_f = +\infty$

$$P_{+\leftarrow -} = \left|\int_{-\infty}^{+\infty} dt'\,\alpha\,\underbrace{\langle +,\lambda_+|\frac{\partial}{\partial\lambda}|-,\lambda_-\rangle}_{\frac{1}{2}\varphi'(\lambda)}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\varphi} dt''\sqrt{\alpha^2 t''^2+\Delta^2}\right)\right|^2$$

$$\varphi'(\lambda) = -\frac{\Delta}{\Delta^2+\lambda^2}$$

Berechnung ergibt

$$P_{+\leftarrow -} = \left| \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \frac{\alpha \Delta}{\Delta^2 + \alpha^2 t'^2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt'' \sqrt{\Delta^2 + \alpha^2 t''^2}\right)\right|^2$$

$$= \frac{\pi^2}{9} e^{-\frac{\pi}{2}\frac{\Delta^2}{\hbar\alpha}}$$

hier muss man überprüfen was höhere Ordnungen ergeben

exakte Rechnung ergibt

$$\boxed{P_{+\leftarrow -} = e^{-\frac{\pi}{2}\frac{\Delta^2}{\hbar\alpha}}}$$

(vgl. Tunneleffekt) auch exponentiell

---

3 Wenzel – Kramers – Brillouin – Näherung

"WKB"

SGL: $i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right] |\psi(t)\rangle$

$$\langle \vec{r} | \psi(t)\rangle = \psi(\vec{r}, t)$$

Def. $\psi(\vec{r}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\vec{r}, t)\right)$

$$\Rightarrow \quad -\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} + V - \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla}^2 S$$

Formaler Limes $\hbar \to 0$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\vec{\nabla} S)^2}{2m} + V = 0$$

Zur Erinnerung:

klass. Hamilton – Jakobi – Gl.

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(\vec{r}, \vec{\nabla} S, t) = 0$$

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V \quad , \quad \vec{\nabla} S = \vec{p}$$

Formal äquivalent, falls Größe S reell

$$S(\vec r,t) = S_0(\vec r,t) + S_1(\vec r,t) + S_2(\vec r,t)$$
$$\sim \hbar^0 \qquad \sim \hbar^1 \qquad \sim \hbar^2$$

$$-\partial_t S_0 = \frac{(\vec\nabla S_0)^2}{2m} + V$$
$$-\partial_t S_1 = \frac{\vec\nabla S \vec\nabla S_1}{2m} - \frac{i\hbar}{2m}\vec\nabla^2 S_0$$

stationäre Zustände

$$S_0(\vec r,t) = S_0(\vec r) - Et$$
$$S_1(\vec r,t) = S_1(\vec r)$$

1 dim

$$S_0(x) = \int_{x_0}^{x} p(x')\,dx'$$

$$S_1(x) = \frac{i\hbar}{2}\ln(p(x)) + \text{const}$$

somit
$$\Psi(x,t) = \frac{c}{\sqrt[4]{2m(E-V(x))}}\, e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{2m(E-V(x'))}\,dx'}\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

oder
$$\Psi(x,t) = \frac{c}{\sqrt[4]{2m(V(x)-E)}}\, e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{2m(V(x')-E)}\,dx'}\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Gamow