Landau-Zener-Übergänge

• Hamiltonoperator: $H(\vec{x})$, $\vec{x}$ adiabatische Variable $\vec{x}(t)$

Instantane stat. Schr.gl.: $\boxed{H(\vec{x})|\psi_n(\vec{x})\rangle = E_n(\vec{x})|\psi_n(\vec{x})\rangle}$

• Betrachte: unitäre Transformation

$$U(\vec{x}_0,\vec{x}) = \sum_n |\psi_n(\vec{x}_0)\rangle\langle\psi_n(\vec{x})| \qquad \vec{x}_0 = \vec{x}(t=t_0)$$

Es ist
$$U(\vec{x}_0,\vec{x})^{-1} = U(\vec{x}_0,\vec{x})^{\dagger} = U(\vec{x},\vec{x}_0)$$
$$U(\vec{x}_0,\vec{x}_0) = \sum_n |\psi_n(\vec{x}_0)\rangle\langle\psi_n(\vec{x}_0)| = \mathbb{1}$$

• Betrachte Zustand: $|\phi(t)\rangle = U(\vec{x}_0,\vec{x})|\psi(t)\rangle$

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

Zeitentwicklung

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\phi(t)\rangle} = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(\vec{x}_0,\vec{x}(t))\right)|\psi(t)\rangle + i\hbar\,U(\vec{x}_0,\vec{x}(t))\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle$$

mit $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H(\vec{x})|\psi(t)\rangle$ und $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U = i\hbar\,\dot{\vec{x}}(t)\,\vec{\nabla}_{\vec{x}}\,U(\vec{x}_0,\vec{x})$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\phi(t)\rangle = \left(i\hbar\,\dot{\vec{x}}\,\vec{\nabla}U + U\,H(\vec{x})\right)\underbrace{\,}_{U(\vec{x},\vec{x}_0)U(\vec{x}_0,\vec{x}) = \mathbb{1}}|\psi(t)\rangle$$

$$= \underbrace{\left(i\hbar\,\dot{\vec{x}}\left(\vec{\nabla}U(\vec{x}_0,\vec{x})\right)U(\vec{x},\vec{x}_0) + U(\vec{x}_0,\vec{x})\,H(\vec{x})\,U(\vec{x},\vec{x}_0)\right)}_{\tilde{H}(\vec{x})}|\phi(t)\rangle$$

$$\boxed{\tilde{H}(\vec{x}) = -i\hbar\,\dot{\vec{x}}\,U(\vec{x}_0,\vec{x})\,\vec{\nabla}_{\vec{x}}\,U(\vec{x},\vec{x}_0) + U(\vec{x}_0,\vec{x})\,H(\vec{x})\,U(\vec{x},\vec{x}_0)}$$

1. Diagonale Terme:

• $U(\vec{x}_0,\vec{x})H(\vec{x})U(\vec{x},\vec{x}_0) = \sum_{nm} |\psi_n(\vec{x}_0)\rangle\underbrace{\langle\psi_n(\vec{x})|H(\vec{x})|\psi_m(\vec{x})\rangle}_{\delta_{nm}E_n(\vec{x})}\langle\psi_m(\vec{x}_0)|$

$= \sum_n |\psi_n(\vec{x}_0)\rangle\langle\psi_n(\vec{x}_0)|E_n(\vec{x})$

• $-i\hbar\,\dot{\vec{x}}\sum_{nm}|\psi_n(\vec{x}_0)\rangle\langle\psi_n(\vec{x})|\vec{\nabla}_{\vec{x}}\psi_m(\vec{x})\rangle\langle\psi_m(\vec{x}_0)|$

⇒ diag. Teil $(n=m)$: $-i\hbar\,\dot{\vec{x}}\sum_n|\psi_n(\vec{x}_0)\rangle\underbrace{\langle\psi_n(\vec{x})|\vec{\nabla}_{\vec{x}}\psi_n(\vec{x})\rangle}_{-i\vec{C}_n(\vec{x})}\langle\psi_n(\vec{x}_0)|$

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

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

• Die diagonalen Terme erhalten die Quantenzahl n und führen mit der Anfangsbedingung $|\phi(t_0)\rangle = |\psi_n(\vec{x}_0)\rangle$ zu

$$\boxed{|\phi(t)\rangle = \exp\Big[\underbrace{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}E_n(\vec{x}(t'))\,dt'}_{\text{dyn. Phase}} + \underbrace{i\int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}}\vec{C}_n(\vec{x}')\,d\vec{x}'}_{\text{Berry-Phase}}\Big]|\psi_n(\vec{x}_0)\rangle}$$

2. Nichtdiagonale Terme:

$$V(t) = -i\hbar \dot{x} \sum_{n\neq m} |\psi_n(x_0)\rangle\langle\psi_m(x_0)|\, \langle\psi_m(x)|\vec{\nabla}_x \psi_m(x)\rangle$$

- Betrachte $\hat{H}(x(t)) = \hat{H}_{diag}(x(t)) + V(t) = H_0(t) + V(t)$
- Störungstheorie Übergang ins Wechselwirkungsbild

$$|\phi_I(t)\rangle = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H_0(t')dt'\right] |\phi(t)\rangle \quad \text{mit} \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\phi_I(t)\rangle = V_I(t)|\phi_I(t)\rangle$$

$$V_I(t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H_0(t')dt'\right] V(t) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H_0(t')dt'\right] \quad \text{mit } [H_0(t), H_0(t')] = 0$$

Übergangswahrscheinlichkeit

$$\boxed{P_{f\leftarrow i} \approx \left|\langle\psi_f(x)|\, U_I(t,t_i)\, |\psi_i(x_0)\rangle\right|^2} \qquad |\phi_I(t)\rangle = U_I(t,t_0)|\phi_I(t_0)\rangle$$

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

$$P_{f\leftarrow i} = \Big| \int_{t_i}^{t} \dot{x} \langle\psi_f(x(t'))|\vec{\nabla}_x \psi_i(x(t'))\rangle \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t'} (E_i(x(t'')) - E_f(x(t'')))dt''\right]$$
$$\cdot \exp\left[i\int_{x_0}^{x} (C_i(x'') - C_f(x''))dx''\right] dt' \Big|^2$$

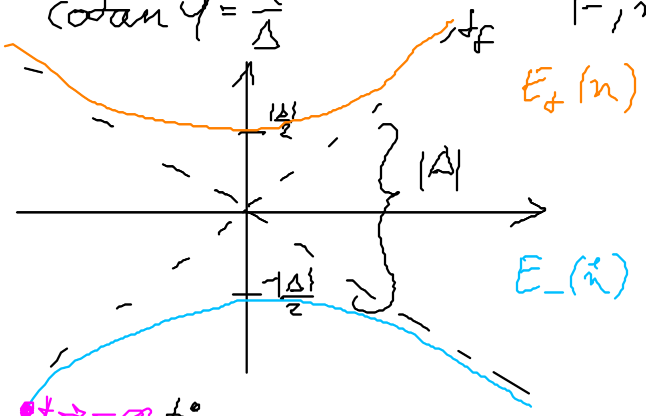
Bei $t = t_0$: $|\psi_0(x(t_i))\rangle \Rightarrow t_i = t_0$

Beispiel: $H(x) = -\frac{1}{2}(x(t)\sigma_z + \Delta\sigma_x)$ mit $x(t) = \alpha\cdot t$, α hinreichend klein

instantane Eigenwerte und Eigenzustände:

$E_\pm = \pm\frac{1}{2}\sqrt{x^2 + \Delta^2}$ mit $|+,x\rangle = -\sin\frac{\varphi}{2}|\uparrow\rangle + \cos\frac{\varphi}{2}|\downarrow\rangle$

$\cot\varphi = \frac{x}{\Delta}$ $\qquad |-,x\rangle = \cos\frac{\varphi}{2}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\varphi}{2}|\downarrow\rangle$



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

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

$$\vdots$$

$$= \Big| \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} dt' \frac{\alpha\Delta}{\Delta^2 + \alpha^2 t'^2} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t'} dt'' \sqrt{\alpha^2 t''^2 + \Delta^2}\right] \Big|^2 \boxed{= \frac{\pi^2}{9} e^{-\frac{\pi}{2}\frac{\Delta^2}{\hbar\alpha}}}$$

- Exakte Rechnung für $\boxed{P_{+\leftarrow -} = \exp\left[-\frac{\pi}{2}\frac{\Delta^2}{\hbar\alpha}\right]}$ für beliebige α

Landau-Zener-Übergänge

Wentzel-Kramers-Brillouin-Näherung "WKB

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

  $\langle \vec{r}|\psi(t)\rangle = \psi(\vec{r},t) =: \exp\left[\frac{i}{\hbar}S(\vec{r},t)\right]$

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

- Formaler Limes $\hbar \to 0$: $\frac{\partial}{\partial t}S + \frac{(\vec{\nabla}S)^2}{2m} + V = 0$ (klassische Mech.)
- Hamilton-Jacobi-Gleichung: $\frac{\partial}{\partial t}S + H(\vec{r}, \vec{\nabla}S, t) = 0$

  $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V \qquad \vec{\nabla}S = \vec{p}$
- Formal äquivalent falls Wirkung S reell ist

  $S(\vec{r},t) = S_0(\vec{r},t) + S_1(\vec{r},t) + \dots$ mit $S_0 \sim \hbar^0$, $S_1 \sim \hbar$, $S_1 \sim \hbar^2, \dots$

  $-\frac{\partial}{\partial t}S_0 = \frac{(\vec{\nabla}S_0)^2}{2m} + V$

  $-\frac{\partial}{\partial t}S_1 = \frac{\nabla S_0 \nabla S_1}{m} - \frac{i\hbar}{2m}\vec{\nabla}^2 S_0$
- für stationäre Zustände $S_0(\vec{r},t) = s_0(\vec{r}) - Et$, $S_1(\vec{r},t) = s_1(\vec{r})$

1 dim $s_0(x) = \int_{x_0}^{x} p(x')\,dx'$; $s_1(x) = \frac{i\hbar}{2}\ln p(x) + \text{const.}$

$$\Rightarrow \psi(x,t) = \frac{C}{\sqrt[4]{2m(E-V(x))}}\exp\left[\pm\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{2m(E-V(x'))}\,dx' - \frac{i}{\hbar}Et\right]$$

oder $$\psi(x,t) = \frac{C}{\sqrt[4]{2m(E-V(x))}}\exp\left[\pm\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\sqrt{2m(V(x')-E)} - \frac{i}{\hbar}Et\right]$$

Tunnelwahrscheinlichkeit $|\psi|^2 \sim \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_a^b\sqrt{2m(V(x)-E)}\,dx\right]$

Gamow-Faktor