

# Kapitola 17

## Náhlá a pomalá změna hamiltoniánu

### Přehled teorie

V této kapitole se pro jednoduchost omezíme na hamiltoniány s prostým čistě bodovým spektrem. Budeme uvažovat změnu hamiltoniánu z  $\hat{H}_0$  na  $\hat{H}_1$ , kterou obecně nelze považovat za malou. Hamiltonián  $\hat{H}_0$  má vlastní vektory  $|\psi_n\rangle$  a vlastní čísla  $E_n$ , tj.

$$\hat{H}_0|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle, \quad \langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{mn}, \quad \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \hat{I}. \quad (17.1)$$

Vlastní čísla a vlastní vektory  $\hat{H}_1$  označíme jako  $|\phi_n\rangle$  a  $\mathcal{E}_n$ , tj. platí

$$\hat{H}_1|\phi_n\rangle = \mathcal{E}_n|\phi_n\rangle, \quad \langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{mn}, \quad \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \hat{I}. \quad (17.2)$$

Bude nás zajímat, jak se změní stav systému, který je na počátku v nějakém vlastním stavu  $\hat{H}_0$ . Zaměříme se na dva limitní případy rychlosti změny - buď bude probíhat velmi pomalu, nebo okamžitě. Při velmi pomalé (adiabatické) změně bude stav částice neustále vlastním vektorem okamžitého hamiltoniánu. Na konci tak bude ve vlastním stavu hamiltoniánu  $\hat{H}_1$ , časovým vývojem pouze získá nějakou fázi. Při náhlé změně se stav částice nestihne změnit a můžeme ji nalézt v různých vlastních stavech nového hamiltoniánu.

### Adiabatická změna

Uvažujme hamiltonián  $\hat{H}(g)$  závislý na parametru  $g$  (může jich být i více) a označíme  $|\psi_n(g)\rangle$  jeho vlastní vektory

$$\hat{H}(g)|\psi_n(g)\rangle = E_n(g)|\psi_n(g)\rangle, \quad \langle\psi_n(g)|\psi_m(g)\rangle = \delta_{nm}. \quad (17.3)$$

Předpokládáme, že vlastní čísla  $E_n(g)$  jsou všechna různá a nekříží se. Parametr  $g$  budeme měnit s časem  $g(t)$  tak, že pro  $t = 0$  je

$$\hat{H}(g(0)) = \hat{H}_0,$$

a pro  $t = T$  platí

$$\hat{H}(g(T)) = \hat{H}_1.$$

Pro vlastní vektory a vlastní čísla platí

$$\begin{aligned} |\psi_n(g(0))\rangle &= |\psi_n\rangle, & E_n(g(0)) &= E_n, \\ |\psi_n(g(T))\rangle &= |\phi_n\rangle, & E_n(g(T)) &= \mathcal{E}_n. \end{aligned}$$

Označíme jako  $\mathcal{G}$  křivku  $\{g(t)|t \in \langle 0, T \rangle\}$ .

Chceme vyřešit Schrödingerovu rovnici

$$\hat{H}(g(t))|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle, \quad (17.4)$$

s časově závislým hamiltoniánem  $\hat{H}(g(t))$ . Budeme hledat řešení ve tvaru

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |\psi_n(g(t))\rangle, \quad (17.5)$$

kde  $\theta_n(t)$  je tzv. dynamická fáze

$$\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(g(t')) dt'. \quad (17.6)$$

Pokud se hamiltonián  $\hat{H}(g(t))$  s časem nemění (tj.  $g(t) = g(0)$ ), pak

$$E_n(g(t)) = E_n(g(0)) = E_n, \quad |\psi_n(g(t))\rangle = |\psi_n(g(0))\rangle = |\psi_n\rangle$$

a dynamická fáze je

$$\theta_n(t) = -\frac{E_n}{\hbar} t.$$

V takovém případě dosazením (17.5) do Schrödingerovy rovnice (17.4) dostaneme

$$\sum_n c_n(t) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} E_n |\psi_n\rangle = i\hbar \sum_n \left( \dot{c}_n(t) - i\frac{E_n}{\hbar} c_n(t) \right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} |\psi_n\rangle,$$

z čehož plyne

$$\forall n \quad \dot{c}_n(t) = 0 \quad \implies \quad c_n(t) = c_n(0).$$

Tím dostaneme obvyklé řešení Schrödingerovy rovnice pro časově nezávislý hamiltonián

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} |\psi_n\rangle,$$

kde  $c_n(0)$  je počáteční podmínka v čase  $t = 0$ .

Předpokládejme nyní  $\dot{g} \neq 0$  (pro lepší přehlednost výrazů teď nebudeme vypisovat závislost na čase). Dosazením (17.5) do (17.4) dostaneme diferenciální rovnici

$$\sum_n c_n e^{i\theta_n} E_n(g) |\psi_n(g)\rangle = i\hbar \sum_n \left( \dot{c}_n |\psi_n(g)\rangle + c_n \dot{g} \left| \frac{d}{dg} \psi_n(g) \right\rangle + i c_n \dot{\theta}_n |\psi_n(g)\rangle \right) e^{i\theta_n}. \quad (17.7)$$

Pro dynamickou fázi z definice (17.6) plyne

$$\dot{\theta}_n = -\frac{E_n(g)}{\hbar},$$

takže poslední člen na levé straně (17.7) se odečte s pravou stranou dostaneme

$$\sum_n \dot{c}_n e^{i\theta_n} |\psi_n(g)\rangle = -\dot{g} \sum_n c_n e^{i\theta_n} \left| \frac{d}{dg} \psi_n(g) \right\rangle.$$

Rovnici skalárně vynásobíme s  $|\psi_m(g)\rangle$ , použijeme (17.3) a nalezneme

$$\dot{c}_m = -\dot{g} c_m \langle \psi_m(g) | \frac{d}{dg} \psi_m(g) \rangle - \dot{g} \sum_{n \neq m} c_n e^{i(\theta_n - \theta_m)} \langle \psi_m(g) | \frac{d}{dg} \psi_n(g) \rangle. \quad (17.8)$$

První braket na pravé straně je ryze imaginární, protože

$$\frac{d}{dg} \underbrace{\langle \psi_m(g) | \psi_m(g) \rangle}_1 = \left\langle \frac{d}{dg} \psi_m(g) | \psi_m(g) \right\rangle + \langle \psi_m(g) | \frac{d}{dg} \psi_m(g) \rangle = 2 \operatorname{Re} \langle \psi_m(g) | \frac{d}{dg} \psi_m(g) \rangle = 0.$$

Označíme ho jako

$$\langle \psi_m(g) | \frac{d}{dg} \psi_m(g) \rangle = i\varphi_m(g),$$

kde  $\varphi_m(g)$  je ryze reálná funkce. Druhý braket na pravé straně (17.8) vyjádříme z bezčasové Schrödingerovy rovnice (17.3), kterou zderivujeme podle  $g$  a skalárně vynásobíme s  $|\psi_m(g)\rangle$

$$\underbrace{\langle \psi_m(g) | \hat{H}(g) | \frac{d}{dg} \psi_n(g) \rangle}_{E_m(g) \langle \psi_m(g) | \frac{d}{dg} \psi_n(g) \rangle} + \langle \psi_m(g) | \frac{d}{dg} \hat{H}(g) | \psi_n(g) \rangle = \frac{dE_n}{dg} \delta_{nm} + E_n(g) \langle \psi_m(g) | \frac{d}{dg} \psi_n(g) \rangle.$$

Pro  $m \neq n$  odsud plyne

$$\langle \psi_m(g) | \frac{d}{dg} \psi_n(g) \rangle = \frac{\langle \psi_m(g) | \frac{d}{dg} \hat{H}(g) | \psi_n(g) \rangle}{E_n(g) - E_m(g)}.$$

Rovnici (17.8) pak zapíšeme ve tvaru

$$\dot{c}_m = -i c_m \varphi_m(g) \dot{g} - \dot{g} \sum_{n \neq m} c_n e^{i(\theta_n - \theta_m)} \frac{\langle \psi_m(g) | \frac{d}{dg} \hat{H}(g) | \psi_n(g) \rangle}{E_n(g) - E_m(g)}. \quad (17.9)$$

Zatím jsme neuvažovali žádné přiblížení a rovnice (17.9) platí přesně. Nyní použijeme tzv. adiabatickou aproximaci, kdy zanedbáme druhý člen na pravé straně (17.9). To lze udělat, pokud platí

$$\frac{1}{T} \max_{\mathcal{G}} |\dot{g}| \frac{|\langle \psi_m(g) | \frac{d}{dg} \hat{H}(g) | \psi_n(g) \rangle|}{|E_n(g) - E_m(g)|^2} \ll 1.$$

Doba potřebná pro adiabatický přechod z  $H_0$  do  $\hat{H}_1$  tak musí být řádově  $T \sim \frac{1}{\Delta^2}$ , kde  $\Delta$  je nejmenší spektrální mezera mezi vlastními čísly  $\hat{H}(g)$

$$\Delta = \min_{\mathcal{G}, i, j} \Delta_{ij}(g) = \min_{\mathcal{G}, i, j} |E_i(g) - E_j(g)|.$$

V adiabatické aproximaci se rovnice (17.9) zjednoduší na

$$\dot{c}_m = -i c_m \varphi_m(g) \dot{g},$$

a jejím řešením je

$$c_m(t) = c_m(0) \exp \left( -i \int_0^t \varphi_m(g(t')) \dot{g}(t') dt' \right).$$

Pokud je na počátku částice ve stavu  $|\psi(0)\rangle = |\psi_n\rangle$ , který je vlastní vektor  $\hat{H}_0$ , pak  $c_m(0) = \delta_{mn}$ . Při adiabatické změně je tedy částice neustále ve vlastním stavu okamžitého hamiltoniánu  $\hat{H}(g(t))$  a platí

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)} |\psi_n(g(t))\rangle,$$

kde  $\gamma_n(t)$  značí tzv. geometrickou (Berryho) fázi

$$\gamma_n(t) = - \int_0^t \varphi_n(g(t')) \dot{g}(t') dt' = i \int_0^t \langle \psi_n(g(t')) | \frac{d}{dg} \psi_n(g(t')) \rangle \dot{g}(t') dt'.$$

Adiabatickou změnou z hamiltoniánu  $\hat{H}_0$  na  $\hat{H}_1$  za čas  $T$  se částice dostaneme do vlastního stavu  $\hat{H}_1$

$$|\psi(T)\rangle = e^{i\theta_n(T)} e^{i\gamma_n(T)} |\phi_n\rangle, \quad (17.10)$$

a získá dynamickou fázi

$$\theta_n(T) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T E_n(g(t)) dt, \quad (17.11)$$

a geometrickou fázi

$$\gamma_n(T) = i \int_0^T \langle \psi_n(g(t)) | \frac{d}{dg} \psi_n(g(t)) \rangle \dot{g}(t) dt = i \int_{\mathcal{G}} \langle \psi_n(g) | \frac{d}{dg} \psi_n(g) \rangle dg = \gamma_n(\mathcal{G}). \quad (17.12)$$

Vidíme, že je určena křivkovým integrálem po křivce  $\mathcal{G}$  v prostoru parametrů. Závisí tedy na jeho geometrii - odtud název geometrická fáze. Na rozdíl od dynamické fáze nezávisí na čase  $T$ , ale pouze na křivce  $\mathcal{G}$ .

## Náhlá změna hamiltoniánu

Řekněme, že pro  $t < 0$  je částice v nějakém vlastním stavu  $|\psi_n\rangle$  hamiltoniánu  $\hat{H}_1$ . Pokud změna hamiltoniánu na  $\hat{H}_1$  proběhne nastane v čase  $t = 0$  okamžitě, pak se stav částice nezmění

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_n\rangle.$$

Pro  $t > 0$  to už ale není stacionární stav, a vyvíjí se s časem podle Schrödingerovy rovnice s hamiltoniánem  $\hat{H}_1$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m \langle \phi_m | \psi_n \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{E}_m t} |\phi_m\rangle.$$

Pravděpodobnost naměření energie  $\mathcal{E}_m$  je tedy

$$W_{\psi_n, \mathcal{E}_m} = |\langle \phi_m | \psi_n \rangle|^2.$$

## Příklady

**Cvičení 50.** *Uvažujte částici v nekonečné potenciálové jámě šířky  $2a$  v základním stavu*

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi}{2} \left(\frac{x}{a} - 1\right)\right).$$

1. *Šířka jámy se pomalu zdvojnásobí za čas  $T$  konstantní rychlostí*

$$a(t) = \left(1 + \frac{t}{T}\right) a.$$

*Jaká je vlnová funkce a energie částice po této adiabatické změně? Určete dynamickou a geometrickou fázi finálního stavu.*

2. *Šířka jámy se náhle zdvojnásobí. Jaké hodnoty energie částice můžeme naměřit a s jakou pravděpodobností?*

**Návod:** Vlastní funkce hamiltoniánu částice v jámě šířky  $2a$  jsou

$$\psi_n(x, a) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2} \left(\frac{x}{a} - 1\right)\right),$$

odpovídající energie jsou

$$E_n(a) = \frac{1}{2M} \left(\frac{n\pi\hbar}{2a}\right)^2.$$

1. Při adiabatické změně bude částice v každém okamžiku na základní hladině okamžitého hamiltoniánu

$$\psi(x, t) = e^{i\theta_1(t)} e^{i\gamma_1(t)} \psi_1(x, a(t)) = e^{i\theta_1(t)} e^{i\gamma_1(t)} \frac{1}{\sqrt{a(t)}} \sin\left(\frac{\pi}{2} \left(\frac{x}{a(t)} - 1\right)\right)$$

Na konci tedy bude mít energii

$$E_1(a(T)) = \frac{1}{2M} \left( \frac{\pi \hbar}{4a} \right)^2 = \mathcal{E}_1.$$

a její stav bude

$$\psi(x, T) = e^{i\theta_1(T)} e^{i\gamma_1(T)} \phi_1(x) = e^{i\theta_1(T)} e^{i\gamma_1(T)} \frac{1}{\sqrt{2a}} \sin \left( \frac{\pi}{2} \left( \frac{x}{2a} - 1 \right) \right).$$

Dynamická fáze (17.11) je rovna

$$\theta_1(T) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T \frac{1}{2M} \left( \frac{\pi \hbar}{2a(t)} \right)^2 dt = -\frac{1}{\hbar} \frac{1}{2M} \left( \frac{\pi \hbar}{2a} \right)^2 \int_0^T \left( \frac{1}{1 + \frac{t}{T}} \right)^2 dt = -\frac{E_1 T}{\hbar} \frac{1}{2}.$$

Pro určení geometrické fáze (17.12) spočítáme nejprve

$$\frac{d}{da} \psi_1(x, a) = -\frac{1}{2a^{\frac{3}{2}}} \underbrace{\sin \left( \frac{\pi}{2} \left( \frac{x}{a} - 1 \right) \right)}_{\frac{1}{2a} \psi_1(x, a)} - \frac{x\pi}{2a^{\frac{5}{2}}} \cos \left( \frac{\pi}{2} \left( \frac{x}{a} - 1 \right) \right).$$

Skalární součin s  $\psi_1(a)$  je nulový

$$\begin{aligned} (\psi_1(a), \frac{d}{da} \psi_1(a)) &= -\frac{1}{2a} - \frac{\pi}{2a^3} \int_{-a}^a x \underbrace{\sin \left( \frac{\pi}{2} \left( \frac{x}{a} - 1 \right) \right) \cos \left( \frac{\pi}{2} \left( \frac{x}{a} - 1 \right) \right)}_{\frac{1}{2} \sin \left( \pi \left( \frac{x}{a} - 1 \right) \right)} dx \\ &= -\frac{1}{2a} - \frac{\pi}{4a^3} \left[ -\frac{a}{\pi} x \cos \left( \pi \left( \frac{x}{a} - 1 \right) \right) - \frac{a^2}{\pi^2} \sin \left( \pi \left( \frac{x}{a} - 1 \right) \right) \right]_{-a}^a \\ &= -\frac{1}{2a} - \frac{\pi}{4a^3} \left( -\frac{2a^2}{\pi} \right) = 0. \end{aligned}$$

Geometrická fáze je v tomto případě nulová

$$\gamma_1(T) = 0.$$

2. Při náhlé změně se vlnová funkce částice nezmění. Vlastní funkce hamiltoniánu pro částici v jámě šířky  $4a$  jsou

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2a}} \sin \left( \frac{n\pi}{4a} (x - 2a) \right), \quad n \in \mathbb{N},$$

a příslušejí energiím

$$\mathcal{E}_n = \frac{1}{2M} \left( \frac{n\pi \hbar}{4a} \right)^2.$$

Musíme určit pravděpodobnosti přechodu

$$W_{\psi_1 \rightarrow \phi_n} = |(\phi_n, \psi_1)|^2 = \frac{1}{2a^2} \left( \int_{-a}^a \sin\left(\frac{n\pi}{4a}(x-2a)\right) \sin\left(\frac{\pi}{2a}(x-a)\right) dx \right)^2.$$

Pro ilustraci jsou vlnové funkce  $\psi_1$  a  $\phi_n$ ,  $n = 1, 2, 3$ , znázorněny na obrázku 17.1. Vlnové funkce s lichým  $n$  jsou sudé, vlnové funkce se sudým  $n$  liché. Základní stav  $\psi_1$  tak může přejít pouze do stavů  $\phi_n$  s  $n$  lichým, tj. můžeme naměřit pouze některou z energií  $\mathcal{E}_{2k+1}$ . Skalární součin  $\psi_1$  a  $\phi_{2k+1}$  lze vyjádřit ve tvaru

$$(\phi_{2k+1}, \psi_1) = -\frac{8 \left( \cos \frac{k\pi}{2} + \sin \frac{k\pi}{2} \right)}{(2k+3)(2k-1)\pi}.$$

Pravděpodobnost naměření energie  $\mathcal{E}_{2k+1}$  je potom

$$W_{\psi_1 \rightarrow \phi_{2k+1}} = \frac{64}{(2k+3)^2(2k-1)^2\pi^2}.$$

Pravděpodobnost rychle klesá s rostoucím  $k$ , pro první tři hladiny dostaneme

$$\begin{aligned} W_{\psi_1 \rightarrow \phi_1} &= \frac{64}{9\pi^2} \approx 0.72, \\ W_{\psi_1 \rightarrow \phi_3} &= \frac{64}{25\pi^2} \approx 0.26, \\ W_{\psi_1 \rightarrow \phi_5} &= \frac{64}{441\pi^2} \approx 0.015. \end{aligned}$$

**Cvičení 51.** Uvažujte částici se spinem  $\frac{1}{2}$  v pomalu rotujícím magnetickém poli

$$\vec{B}_1(t) = B_1 \vec{n}(t) = B_1 (\sin \theta \cos \omega t, -\sin \theta \sin \omega t, \cos \theta),$$

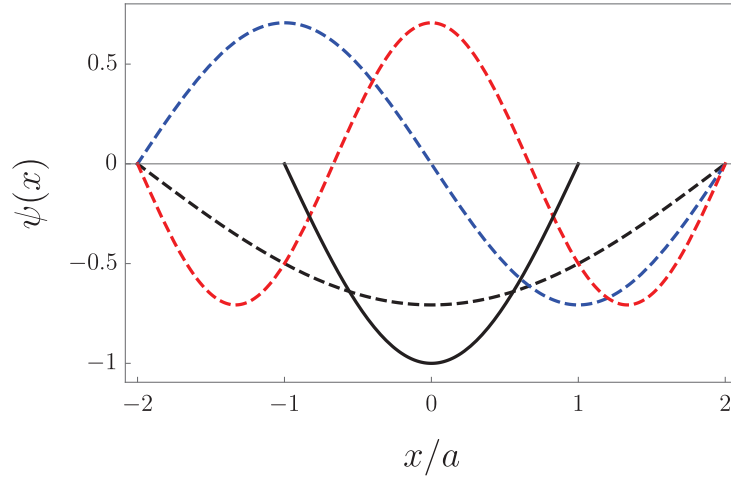
a hamiltoniánem

$$\begin{aligned} \hat{H}(\vec{n}(t)) &= -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}_1(t) = -\omega_1 \vec{n}(t) \cdot \hat{\vec{S}} = -\omega_1 \hat{S}_{\vec{n}(t)} \\ &\equiv -\frac{\hbar\omega_1}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{i\omega t} \\ \sin \theta e^{-i\omega t} & -\cos \theta \end{pmatrix}, \quad \omega_1 = \frac{\mu B_1}{\hbar}. \end{aligned}$$

V čase  $t = 0$  je částice ve vlastním stavu  $\hat{H}(\vec{n}(0))$  s energií  $E_+ = -\frac{\hbar\omega_1}{2}$ . Určete dynamickou a geometrickou fázi za dobu jedné periody magnetického pole  $\vec{B}_1(t)$ , tj.  $T = \frac{2\pi}{\omega}$ . Porovnejte výsledek získaný v rámci adiabatické aproximace s přesným postupem z kapitoly 15.

**Návod:** V adiabatické aproximaci bude částice neustále ve vlastním stavu okamžitého hamiltoniánu  $\hat{H}(\vec{n}(t))$ . Vlastní čísla  $\hat{H}(\vec{n}(t))$  jsou na čase nezávislá

$$E_{\pm}(\vec{n}(t)) = \mp \frac{\hbar\omega_1}{2}.$$



Obrázek 17.1: Porovnání vlnové funkce základního stavu  $\psi_1(x)$  jámy šířky  $2a$  (černá čára) a prvních tří stavů  $\psi_n(x)$  jámy šířky  $4a$  (čárkované čáry, černá -  $n = 1$ , modrá -  $n = 2$ , červená -  $n = 3$ ). Stavů s lichým  $n$  jsou sudé funkce, se sudým  $n$  liché funkce.

Vlastní stavy  $|\psi_{\pm}(\vec{n}(t))\rangle$  odpovídají kladné a záporné projekci spinu do směru  $\vec{n}(t)$

$$|\psi_+(\vec{n}(t))\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{-i\omega t} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |\psi_-(\vec{n}(t))\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ e^{-i\omega t} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

Počáteční stav odpovídá kladné projekci spinu do směru  $\vec{n}(0)$ , tj.

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_+(\vec{n}(0))\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

Za jednu periodu  $T = \frac{2\pi}{\omega}$  magnetického pole  $\vec{B}_1$  se v adiabatické aproximaci (17.10) částice dostane do stavu

$$|\psi(T)\rangle = e^{i\theta_+(T)} e^{i\gamma_+(T)} |\psi_+(\vec{n}(T))\rangle = e^{i\theta_+(T)} e^{i\gamma_+(T)} |\psi_+(\vec{n}(0))\rangle.$$

Dynamická fáze (17.11) za jednu periodu je

$$\theta_+(T) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T E_+(\vec{n}(t)) dt = \frac{\omega_1 T}{2} = \pi \frac{\omega_1}{\omega}. \quad (17.13)$$

Pro výpočet geometrické fáze (17.12) nejprve určíme skalární součin

$$i\langle \psi_+(\vec{n}(t)) | \frac{d}{dt} \psi_+(\vec{n}(t)) \rangle = i \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\omega t} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -i\omega e^{-i\omega t} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \omega \sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{\omega}{2} (1 - \cos \theta).$$



Geometrická fáze je potom rovna

$$\gamma_+(t) = i \int_0^T \langle \psi_+(\vec{n}(t)) | \frac{d}{dt} \psi_+(\vec{n}(t)) \rangle dt = \frac{\omega}{2} (1 - \cos \theta) \frac{2\pi}{\omega} = \pi(1 - \cos \theta).$$

Vidíme, že na rozdíl od dynamické fáze výsledek nezávisí na čase (ve vztahu není  $T$  ani  $\omega$ ).

Ke stejnému výsledku se můžeme dopracovat o něco složitější cestou s použitím křivkového integrálu přímo bez parametrizace křivky časem. Prostor parametrů hamiltoniánu  $\hat{H}(\vec{n})$  je jednotková koule, tj. prostorové úhly  $\theta$  a  $\varphi$  jednotkového vektoru  $\vec{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ . Vlastní stav  $\hat{H}(\vec{n})$  s energií  $E_+(\vec{n}) = -\frac{\hbar\omega_1}{2}$  má kladnou projekci spinu do směru  $\vec{n}$ , tj.

$$|\psi_+(\vec{n})\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

Při výpočtu geometrické fáze pak ve vztahu (17.12) musíme nahradit

$$\begin{aligned} \frac{d}{dg} &\longrightarrow \vec{\nabla}_{\vec{n}} = \vec{\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{\varphi} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ dg &\longrightarrow d\vec{n} = \vec{\theta} d\theta + \vec{\varphi} \sin \theta d\varphi, \end{aligned}$$

kde  $\vec{\theta}$  a  $\vec{\varphi}$  jsou jednotkové vektory ve směru  $\theta$  a  $\varphi$ . Geometrická fáze po křivce  $\mathcal{G}$  je potom

$$\gamma_+(\mathcal{G}) = i \int_{\mathcal{G}} \langle \psi_+(\vec{n}) | \vec{\nabla}_{\vec{n}} | \psi_+(\vec{n}) \rangle \cdot d\vec{n}.$$

Určíme nejprve braket v integrandu

$$\begin{aligned} \langle \psi_+(\vec{n}) | \vec{\nabla}_{\vec{n}} | \psi_+(\vec{n}) \rangle &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \left[ \frac{1}{2} \vec{\theta} \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} + \vec{\varphi} \frac{1}{\sin \theta} \begin{pmatrix} 0 \\ ie^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \right] \\ &= i \frac{\sin^2 \frac{\theta}{2}}{\sin \theta} \vec{\varphi}. \end{aligned}$$

Celý integrand je potom

$$i \langle \psi_+(\vec{n}) | \vec{\nabla}_{\vec{n}} | \psi_+(\vec{n}) \rangle \cdot d\vec{n} = -\sin^2 \frac{\theta}{2} d\varphi = -\frac{1}{2} (1 - \cos \theta) d\varphi.$$

V našem konkrétním případě  $\vec{n}(t)$  odpovídá  $\theta = \text{konst.}$  a  $\varphi(t) = -\omega t$ ,  $t \in \langle 0, \frac{2\pi}{\omega} \rangle$ , tj.  $\mathcal{G}$  je uzavřená křivka na jednotkové kouli (kružnice) orientovaná proti směru hodinových ručiček. Geometrická fáze je potom

$$\gamma_+(\mathcal{G}) = - \oint_{\mathcal{G}} \frac{1}{2} (1 - \cos \theta) d\varphi = \pi(1 - \cos \theta),$$

což je stejný výsledek jaký jsme obdrželi při parametrizaci křivky pomocí času. Výsledek lze interpretovat tak, že geometrická fáze odpovídá polovině prostorového úhlu vymezeného uzavřenou křivkou  $\mathcal{G}$

$$\gamma_+(\mathcal{G}) = \frac{1}{2}\Omega(\mathcal{G}).$$

Přejděme k porovnání s přesným výpočtem - evoluční operátor pro tento systém jsme určili v (15.7), kde položíme  $B_0$ , tj.  $\omega_0 = 0$  a  $\Delta = \omega$ . Přesný stav částice po čase  $T = \frac{2\pi}{\omega}$  bude

$$|\psi(T)\rangle = \begin{pmatrix} -\cos \frac{\theta}{2} \left( \cos \left( \frac{\Omega}{\omega} \pi \right) + i \frac{\omega_1 - \omega}{\Omega} \sin \left( \frac{\Omega}{\omega} \pi \right) \right) \\ -\sin \frac{\theta}{2} \left( \cos \left( \frac{\Omega}{\omega} \pi \right) + i \frac{\omega_1 + \omega}{\Omega} \sin \left( \frac{\Omega}{\omega} \pi \right) \right) \end{pmatrix}, \quad (17.14)$$

kde  $\Omega$  je Rabiho frekvence (15.4)

$$\Omega = \sqrt{\omega_1^2 - 2\omega_1\omega \cos \theta + \omega^2}. \quad (17.15)$$

Pro porovnání s adiabatickou aproximací musíme předpokládat, že  $\omega_1 \gg \omega$ . Pak přibližně platí

$$\frac{\omega_1 \pm \omega}{\Omega} \approx 1.$$

Přesný stav (17.14) pak můžeme aproximovat pomocí

$$|\psi(T)\rangle \approx -e^{i\frac{\Omega}{\omega}\pi} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \exp \left( i\pi \left( 1 + \frac{\Omega}{\omega} \right) \right) |\psi_+(\vec{n}(0))\rangle, \quad (17.16)$$

kde jsme použili  $e^{i\pi} = -1$ . Rabiho frekvenci (17.15) lze aproximovat

$$\Omega = \omega_1 \sqrt{1 - 2\frac{\omega}{\omega_1} \cos \theta + \left( \frac{\omega}{\omega_1} \right)^2} \approx \omega_1 \left( 1 - \frac{\omega}{\omega_1} \cos \theta \right).$$

V tomto přiblížení je celková fáze stavu (17.16) rovna součtu dynamické a geometrické fáze

$$\pi \left( 1 + \frac{\Omega}{\omega} \right) \approx \pi \left( 1 + \frac{\omega_1}{\omega} - \cos \theta \right) = \underbrace{\pi \frac{\omega_1}{\omega}}_{\theta_+(T)} + \underbrace{\pi (1 - \cos \theta)}_{\gamma_+(T)}.$$

**Cvičení 52.** Uvažujte lineární harmonický oscilátor s hamiltoniánem

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 \hat{X}^2 = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}M\omega^2 x^2,$$

a vlastními funkcemi

$$\psi_n(x) = \left( \frac{\kappa^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} H_n(\kappa x) e^{-\frac{1}{2}\kappa^2 x^2}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}. \quad (17.17)$$

LHO je v základním (vakuovém) stavu

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\kappa^2}{\pi}\right)^2 e^{-\frac{1}{2}\kappa^2 x^2}. \quad (17.18)$$

V čase  $t = 0$  dojde k náhlé změně potenciálu:

1. Náhle přesuneme střed potenciálové jámy z  $x_0 = 0$  do  $x_0 = -\frac{\sqrt{2}\alpha}{\kappa}$  a současně snížíme potenciál o  $\alpha^2\hbar\omega$ . Jaké je pravděpodobnostní rozdělení energií nového hamiltoniánu  $\hat{H}_1$  ve stavu (17.18)?
2. Náhle změníme frekvenci oscilátoru na  $\omega' = \frac{\omega}{s}$ ,  $s > 0$ . Vyjádřete střední kvadratické odchylky polohy a hybnosti vakuového stavu původního LHO (17.18) pomocí  $s$  a  $\kappa' = \frac{1}{\sqrt{s}}\kappa$ , a porovnejte je se středními hodnotami vakuového stavu nového hamiltoniánu.

**Návod:**

1. Hamiltonián po změně je

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}M\omega^2 \left(x + \frac{\sqrt{2}\alpha}{\kappa}\right)^2 - \alpha^2\hbar\omega.$$

Označíme  $y = x + \frac{\sqrt{2}\alpha}{\kappa}$ , hamiltonián v nové proměnné je pak shodný s hamiltoniánem LHO s energií posunutou o konstantu

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2}M\omega^2 y^2 - \alpha^2\hbar\omega.$$

Energie nového hamiltoniánu jsou tedy

$$\mathcal{E}_n = \left(n + \frac{1}{2} - \alpha^2\right) \hbar\omega.$$

Příslušné vlastní funkce  $\phi_n$  jsou stejné jako pro LHO (17.17), tj.  $\phi_n(y) = \psi_n(y)$ . Převedený do nové proměnné je vakuový stav původního LHO (17.18) roven

$$\psi_0(x) = \psi_0 \left(y - \frac{\sqrt{2}\alpha}{\kappa}\right) = \left(\frac{\kappa^2}{\pi}\right)^2 e^{-\frac{1}{2}\kappa^2(y-\sqrt{2}\alpha)^2} \equiv \rho_\alpha(y).$$

Je tedy shodný s koherentním stavem nového LHO s amplitudou  $\alpha \in \mathbb{R}$ , pro který rozdělení energií známe

$$W_{\alpha,n} = |(\phi_n, \rho_\alpha)|^2 = \frac{\alpha^{2n}}{n!} e^{-\alpha^2}.$$

Koherentní stavy nového LHO lze tedy chápat jako posunutý vakuový stav původního LHO.

2. Nový hamiltonián je LHO s jinou frekvencí  $\omega'$

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} M \omega'^2 x^2$$

Jeho vlastní funkce  $\phi_n$  jsou stejné jako pro původní LHO (17.17), kde nahradíme

$$\kappa \longrightarrow \kappa' = \frac{1}{\sqrt{s}} \kappa.$$

Vakuový stav původního LHO (17.18) zapsaný pomocí  $\kappa'$  je

$$\psi_0(x) = \left( \frac{s\kappa'^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{s}{2}\kappa'^2 x^2} \equiv \beta_s(x),$$

pro  $s \neq 1$  se nejedná o vlastní vektor nového  $\hat{H}_1$ . Hustota pravděpodobnosti nalezení oscilátoru v bodě  $x$  má tvar Gaussova rozdělení

$$|\beta_s(x)|^2 = \left( \frac{s\kappa'^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-s\kappa'^2 x^2}.$$

Střední kvadratická odchylka polohy je tedy

$$\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2s\kappa'}}.$$

Funkce  $\beta_s(x)$  je reálná, takže střední hodnota hybnosti je nulová. Pro varianci hybnosti pak platí

$$\begin{aligned} (\Delta p)^2 &= \langle \hat{P}^2 \rangle_{\beta_s} = \left( \hat{P} \beta_s, \hat{P} \beta_s \right) = \hbar^2 s^2 \kappa'^2 \int_{\mathbb{R}} x^2 |\beta_s(x)|^2 \\ &= \hbar^2 s^2 \kappa'^2 \left( \frac{s\kappa'^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{\pi}{s\kappa'^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2s\kappa'^2} = \frac{s\kappa'^2 \hbar^2}{2}. \end{aligned}$$

Střední kvadratická odchylka hybnosti je tedy

$$\Delta p = \sqrt{\frac{s}{2}} \kappa' \hbar.$$

Stav  $\beta_s$  samozřejmě minimalizuje Heisenbergovy relace neurčitosti (je to základní stav původního LHO, což je současně i koherentní stav)

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}.$$

Vakuový stav  $\phi_0$  nového LHO odpovídá  $s = 1$ , takže jeho střední kvadratické odchylky polohy a hybnosti jsou

$$\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2\kappa'}}, \quad \Delta p = \frac{\kappa' \hbar}{\sqrt{2}}$$

Je tedy vidět, že pro  $s > 1$  má  $\beta_s$  menší neurčitost v poloze a současně větší neurčitost v hybnosti, než vakuový stav  $\phi_0$ . Pro  $s < 1$  se naopak v porovnání s  $\phi_0$  zmenší neurčitost v hybnosti na úkor zvětšení neurčitosti v poloze.  $\beta_s$  lze chápat jako tzv. stlačený vakuový stav  $\phi_0$ . Kombinací posunutí středu potenciálu, snížení potenciálu (viz. bod 1) a změny frekvence oscilátoru bychom z vakuového stavu původního LHO připravili tzv. stlačený koherentní stav nového LHO.