Landau-Zener

Mateus Marques

4 de junho de 2022

1 Filosofia

1.1 Caso *muito fácil*

Sempre escreveremos:

$$\psi(t) = c_1(t) |\uparrow\rangle + c_2(t) |\downarrow\rangle .$$

Analisemos o caso muito fácil em que:

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \alpha t/2 & 0 \\ 0 & -\alpha t/2 \end{bmatrix}.$$

As energias claramente são $E_{\pm} = \pm\frac{\alpha t}{2}$. Note que ao resolver a equação de Schrödinger:

$$c_1(t) = c_1(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_+(u)\,\mathrm{d}u\right),$$

$$c_2(t) = c_2(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_-(u)\,\mathrm{d}u\right).$$

De maneira que $|c_1(t)|$ e $|c_2(t)|$ são constantes (somente as fases deles ficam oscilando).

Em particular, se a condição inicial é tal que $\psi_{\text{inicial}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, temos que a energia é *definitivamente* E_+ para sempre.

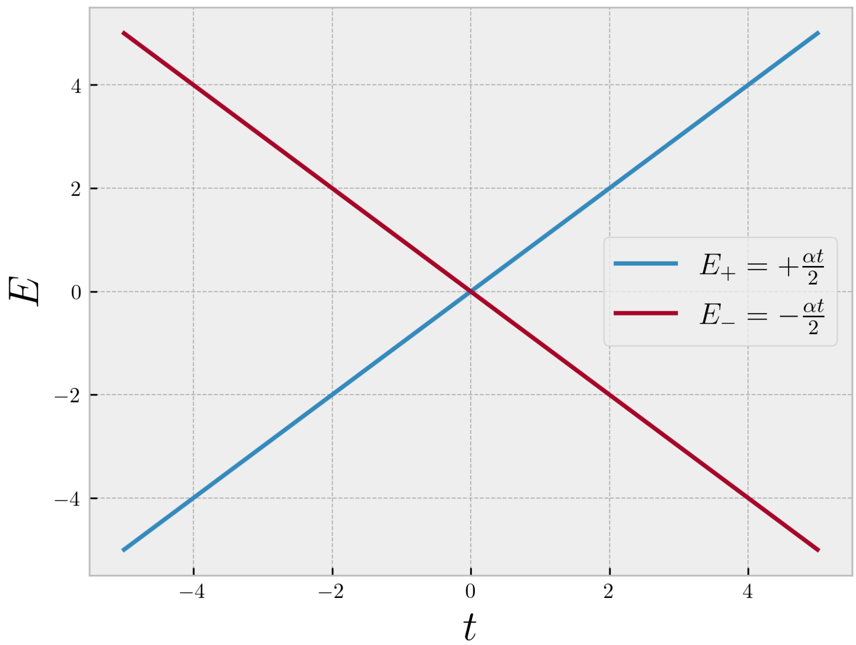

Figura 1: Energias do problema muito fácil.

1.2 Caso *só fácil*

Agora vamos supor a existência de um termo que não mais torna o $\mathcal{H}$ diagonal:

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \alpha t/2 & \Delta/2 \\ \Delta^*/2 & -\alpha t/2 \end{bmatrix}.$$

As energias agoram são $E_{\pm} = \pm\frac{1}{2}\sqrt{(\alpha t)^2 + |\Delta|^2}$.

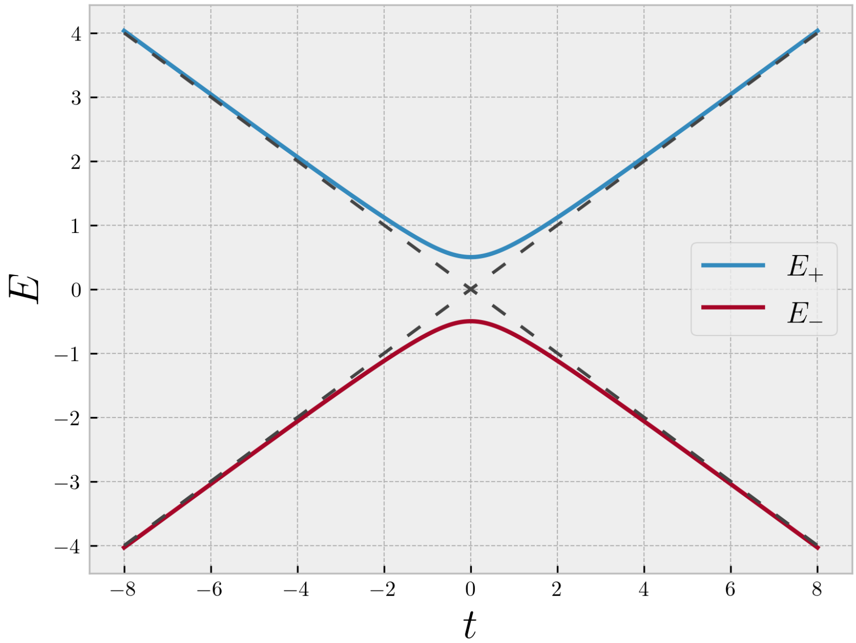

Figura 2: Energias do problema só fácil.

O que acontece quando $\Delta \to 0$?

2 Aproximação?

Nosso hamiltoniano pode ser aproximado por:

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \alpha t/2 & \Delta/2 \\ \Delta^*/2 & -\alpha t/2 \end{bmatrix}.$$

Vou tentar convencer vocês (e também a mim próprio) com alguns gráficos.

3 Cálculo Real

Schrödinger:

$$\begin{bmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{bmatrix} = \frac{-i}{\hbar} \begin{bmatrix} \alpha t/2 & \Delta/2 \\ \Delta^*/2 & -\alpha t/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}.$$

Derivando, fazendo as contas e verificando que está tudo certo dimensionalmente:

$$\ddot{c}_1 + \left(\frac{i\alpha}{2\hbar} + \frac{\alpha^2 t^2}{4\hbar^2} + \frac{|\Delta|^2}{4\hbar^2} \right) c_1 = 0 \tag{1}$$

Quando $t \to \pm\infty$, temos que

$$\mathcal{H}_{t\to\pm\infty} \approx \begin{bmatrix} \alpha t/2 & 0 \\ 0 & -\alpha t/2 \end{bmatrix}.$$

Este é o caso *muito fácil.* Logo, esperamos fisicamente que, quando $t \to \pm\infty$, tenhamos que os módulos de c_1 e c_2 se estabilizem em uma constante. Em outras palavras:

$$\exists \lim_{t\to\pm\infty} |c_1(t)| = |c_1(\pm\infty)|.$$

Considerando então $t \gg 1$, escrevamos $c_1(t) = |c_1|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi(t)}$. Substituindo isso em (1) temos

$$\frac{1}{\hbar^2}\left[\dot{\varphi}^2 + \frac{1}{4}\big(\alpha^2 t^2 + |\Delta|^2 \big) \right] + \frac{i}{\hbar}\left[\frac{\alpha}{2} - \ddot{\varphi} \right] = 0.$$

Igualando as partes reais e imaginárias:

$$\begin{cases} \dot{\varphi} = \pm\frac{1}{2}\sqrt{\alpha^2 t^2 + |\Delta|^2}, \quad t \gg 1 \\ \ddot{\varphi} = \frac{\alpha}{2} \end{cases}$$

Com uma série de Taylor de primeira ordem para $\dot{\varphi}$:

$$\dot{\varphi} = \frac{\alpha t}{2}\sqrt{1 + \frac{|\Delta|^2}{\alpha^2 t^2}} \approx \frac{\alpha t}{2} + \frac{|\Delta|^2}{4\alpha t}, \quad t \to \pm\infty,$$

obtemos que

$$\left(\frac{\dot{c}_1}{c_1} \right)_{t\to\pm\infty} = -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\alpha t}{2} + \frac{|\Delta|^2}{4\alpha t} \right). \tag{2}$$

4 Cálculo Complexo

Assumiremos que $\frac{\dot{c}_1}{c_1}$ tem uma extensão analítica para o semiplano complexo superior ou inferior. Com isso, temos os seguintes resultados para o valor principal de Cauchy:

$$\int_\Gamma \frac{\dot{c}_1}{c_1}(z)\,\mathrm{d}z = 0 \;\Rightarrow$$

$$\ln\left[\frac{c_1(+\infty)}{c_1(-\infty)} \right] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\dot{c}_1}{c_1}(t)\,\mathrm{d}t = -\int_{\Gamma_\pm} \frac{\dot{c}_1}{c_1}(z)\,\mathrm{d}z$$

onde $\Gamma_\pm$ é o arco de semicírculo superior ou inferior.

Observação. Note que $c_1(\pm\infty)$ não faz sentido, o que estamos interessados é $|c_1(\pm\infty)|$. O que quero dizer acima é:

$$\lim_{T\to\infty}\frac{c_1(T)}{c_1(-T)}.$$

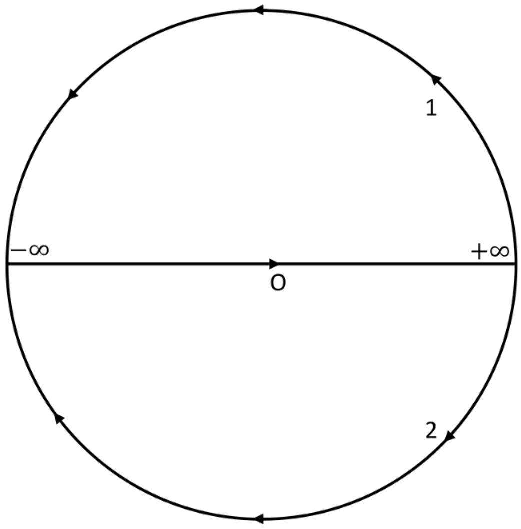

Figura 3: Integração em algum dos semicírculos do plano complexo.

Como $\frac{\dot{c}_1}{c_1}(z)$ é analítica por hipótese, pela equação (2) podemos estender a fórmula para $z \in \mathbb{C}$

$$\left(\frac{\dot{c}_1}{c_1}\right)_{z\to\pm\infty} = -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\alpha z}{2} + \frac{|\Delta|^2}{4\alpha z}\right)$$

e integraremos com $z = Re^{i\theta}$ e $\mathrm{d}z = iRe^{i\theta}\,\mathrm{d}\theta$:

$$-\int_{\Gamma_\pm}\frac{\dot{c}_1}{c_1}(z)\,\mathrm{d}z = \frac{i}{\hbar}\int_{\Gamma_\pm}\left(\frac{\alpha z}{2} + \frac{|\Delta|^2}{4\alpha z}\right)\mathrm{d}z =$$

$$\frac{i}{\hbar}\lim_{R\to\infty}\int_0^{\pm\pi}\left(\frac{\alpha Re^{i\theta}}{2} + \frac{|\Delta|^2}{4\alpha Re^{i\theta}}\right)iRe^{i\theta}\,\mathrm{d}\theta =$$

$$\frac{i}{\hbar}\lim_{R\to\infty}\int_0^{\pm\pi}\left(\frac{i\alpha R^2e^{2i\theta}}{2} + \frac{i|\Delta|^2}{4\alpha}\right)\mathrm{d}\theta =$$

$$\frac{i}{\hbar}\lim_{R\to\infty}\left[\cancelto{0}{\int_0^{\pm\pi}\frac{i\alpha R^2e^{2i\theta}}{2}\,\mathrm{d}\theta} + \int_0^{\pm\pi}\frac{i|\Delta|^2}{4\alpha}\,\mathrm{d}\theta\right] \Rightarrow$$

$$\ln\left[\frac{c_1(+\infty)}{c_1(-\infty)}\right] = \pm\frac{\pi|\Delta|^2}{4\hbar\alpha} \Rightarrow$$

$$P_{\mathrm{LZ}} = |c_1(+\infty)|^2 = |c_1(-\infty)|^2\exp\left(\pm\frac{\pi|\Delta|^2}{2\hbar\alpha}\right)$$

Considerando o caso particular $|c_1(-\infty)|^2 = 1$ e que $P_{\mathrm{LZ}} \leq 1$, devemos ter que

$$P_{\mathrm{LZ}} = \exp\left(-\frac{\pi|\Delta|^2}{2\hbar\alpha}\right) = \exp\left[\frac{-\pi|\Delta|^2}{2\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\epsilon_1 - \epsilon_2)}\right].$$

Perceba que isso correspondeu à integração no caminho Γ_+ (caminho 1 na Figura 3).

5 Referência

Le Tuan Anh Ho, Liviu F. Chibotaru. *A simple derivation of the Landau-Zener formula.*