Май 2005 г. **Том 175, № 5**

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

Формула Майораны и задача Ландау – Зинера – Штюкельберга о квазипересечении уровней

Ф. Ди Джакомо, Е.Е. Никитин

Обсуждается формула Майораны для переориентации спина в магнитном поле, которое почти исчезает в некоторый момент, в связи с решением задачи Ландау, Зинера и Штюкельберга о неадиабатических переходах между квазипересекающимися уровнями.

PACS numbers: **01.40.–d**, **01.65.+g**, **03.65–w**

В 1932 г. Майорана опубликовал работу по динимике произвольного квантового углового момента в переменном магнитном поле [1]. Эта работа содержит две части: в первой описывается процедура сведения общей задачи к задаче о спине 1/2, а во второй обсуждается динамика двухуровневой системы в потенциале, зависящем от времени. Первая часть, результаты которой были повторены позже [2, 3] и которая привлекла большое внимание, неоднократно комментировалась (см., например, [4]) и цитируется в учебниках по квантовой механике [5]. Вторая часть упоминается редко, и ее результат — поведение спина 1/2 в магнитном поле, одна компонента которого линейно зависит от времени, — мало известен. Однако аналитическое решение этой задачи имеет много общего с результатами других хорошо известных работ того же года, в которых рассматриваются неадиабатические переходы при атомных столкновениях в ситуации так называемого квазипересечения уровней [6 – 9]. В этой заметке мы хотели обратить внимание на работу Майораны и связать ее результат с результатами других работ, которые весьма важны в теории столкновений атомов и молекул при низких энергиях. При этом мы отметим различие в подходах к проблеме квазипересечения в работах Ландау [6, 7], Зинера [8] и Штюкельберга [9], которое, по нашему мнению, не отражено должным образом в существующей литературе.

Задача о неадиабатической динамике в двухуровневой одномерной системе при столкновениях рассматривалась в [6 – 9] в двух предположениях. Первое касается вида матрицы потенциальной энергии в области квазипересечения, а второе относится к трактовке движения ядер в этой области.

Ф. Ди Джакомо (F.Di Giacomo). Department of Chemical Engineering and Materials, University of Rome "La Sapienza" Via del Castro Laurenziano 7, I-00161 Rome, Italy
Е.Е. Никитин (E.E.Nikitin). Max-Planck Institut für Biophysikalische Chemie, Tammannstrasse 6, D-37077 Göttingen, Germany; Department of Chemistry, Technion-Israel Institute of Technology, Haifa 32000, Israel

Статья поступила 27 февраля 2005 г.

Матрица потенциальной энергии (матрица второго порядка для гамильтониана электронов) в области неадиабатического взаимодействия выбиралась в форме, которая содержит единственную координату R:

$$\mathbf{V}(R) = \begin{pmatrix} E_c - F_2(R - R_c) & a \\ a & E_c - F_1(R - R_c) \end{pmatrix}, \qquad (1)$$

где E_c, R_c, F_1, F_2, a — параметры, не зависящие от R. Матрица $\mathbf{V}$ полностью задает двухуровневую задачу в адиабатическом приближении, поскольку ее собственные значения дают адиабатические потенциальные кривые в ситуации квазипересечения. Заметим, что вид этой матрицы соответствует картине так называемого узкого квазипересечения, поскольку вдали от R_c расщепление между собственными значениями может быть сделано много больше минимального расщепления при $R = R_c$, которое равно $2a$.

Для рассмотрения неадиабатических эффектов следует учесть движение ядер с ненулевой скоростью. Предположение, которое принималось в [6 – 9], формулировалось как условие, что локальная кинетическая энергия ядер в области квазипересечения при $R = R_c$ значительно больше, чем адиабатическое расщепление $2a$:

$$\frac{\mu v_c^2}{2} \gg 2a\,. \qquad (2)$$

Здесь μ — приведенная масса ядер, а v_c — скорость относительного движения при $R = R_c$. Заметим, что условие (2) означает удаленность области квазипересечения от точек поворота, в которых кинетическая энергия исчезает. Параметры, входящие в выражение (1), могут быть скомбинированы со скоростью в безразмерное отношение

$$\zeta = \frac{2\pi a^2}{\hbar\,|F_1 - F_2|\,v_c}\,, \qquad (3)$$

которое имеет смысл параметра Месси в области квазипересечения.

Ландау в работе [6] нашел вероятность перехода в пределе почти внезапных возмущений (NS, условие $\zeta \ll 1$) в первом порядке теории возмущений в адиабатическом базисе с функциями ВКБ. Вероятность перехода для двукратного прохождения области взаимодействия (при сближении и разлете атомов) имеет вид

$$\mathsf{P}^{\mathrm{L,NS}}_{\mathrm{WKB}} = 4\zeta \sin^2(\Phi^{\mathrm{L}})\,, \qquad (4)$$

где Φ^{L} — некоторая фаза, набегающая за время движения системы от области квазипересечения к точкам поворота, причем условие (2) может быть переписано в виде $\Phi^{\mathrm{L}} \gg 1$. Если $\mathsf{P}^{\mathrm{L,NS}}_{\mathrm{WKB}}$ усреднить по быстрым осцилляциям, оно дает среднюю вероятность $\bar{\mathsf{P}}^{\mathrm{L,NS}}_{\mathrm{WKB}} = 2\zeta$.

В работе [7] Ландау вычислил вероятность перехода в пределе почти-адиабатических возмущений (NA, условие $\zeta \gg 1$), используя теорию возмущений в адиабатическом базисе и вводя аналитическое продолжение функций адиабатической потенциальной энергии в область комплексных значений координаты R. Выражение для вероятности перехода при однократном прохождении имеет вид

$$P^{\mathrm{L,NA}}_{\mathrm{JWKB}} = C \exp(-\zeta)\,, \qquad (5)$$

где ожидаемое значение множителя C должно быть, по Ландау, порядка единицы.

Зинер [8] рассмотрел задачу об однократном прохождении для гамильтониана, зависящего от времени,

$$\hat{H}(t) = \hat{V}[R(t)]\,,$$

положив в формуле (1)

$$R - R_c = v_c t\,.$$

Он построил систему двух временны́х уравнений для амплитуд состояний, описывающих неадиабатическую динамику электронов в области квазипересечения для равномерного классического движения ядер (так называемое полуклассическое приближение, SC). Два уравнения первого порядка были преобразованы в одно уравнение второго порядка, и последнее было решено в функциях параболического цилиндра. Используя известные (из "библии" трансцендентных функций [10]) асимптотики, Зинер нашел точную формулу для вероятности перехода

$$P^{\mathrm{Z}}_{\mathrm{SC}} = \exp(-\zeta)\,. \qquad (6)$$

Если игнорировать замечание Зинера [8], что показатель экспоненты в (6) отличается от такового в формуле Ландау (5) (сообщенной ему Розенкевичем) множителем 2π, то находим, что множитель C в (5) равен единице и что экспоненциальная форма для вероятности перехода в формуле (5) справедлива для любых величин параметра ζ, а не только для $\zeta \gg 1$. В действительности комментарий Зинера вызван недоразумением, связанным с тем, что Ландау использовал обозначение h вместо $\hbar$.

Если идти далее и выразить усредненную вероятность перехода для двукратного прохождения $\bar{\mathsf{P}}$ через вероятность однократного прохождения P как

$$\bar{\mathsf{P}} = 2P(1-P)\,, \qquad (7)$$

то видно, что (7) при подстановке $P = P^{\mathrm{Z}}_{\mathrm{SC}}$ и $\zeta \ll 1$ воспроизводит усредненную формулу Ландау из выражения (4). Поэтому принято называть выражение для вероятности перехода при однократном прохождении

$$P^{\mathrm{LZ}} = \exp(-\zeta) \qquad (8)$$

формулой Ландау – Зинера.

Штюкельберг [9] рассмотрел два связанных координатных волновых уравнения второго порядка для гамильтониана

$$\hat{H}(R) = \hat{T}(R) + U(R)\,,$$

где $\hat{T}(R)$ — оператор кинетической энергии ядер и $\hat{U}(R)$ — произвольный матричный потенциал, который аппроксимируется матрицей $\mathbf{V}(R)$ в области квазипересечения. При использовании квазиклассического метода Штюкельберг столкнулся с трудностью аналитического продолжения решения ВКБ через так называемые линии Стокса. Успешный, но весьма сложный анализ этой процедуры позволил получить следующее выражение для вероятности двукратного прохождения $\mathsf{P}^{\mathrm{St}}_{\mathrm{WKB}}$ в приближении ВКБ:

$$\mathsf{P}^{\mathrm{St}}_{\mathrm{WKB}} = 4\exp(-\zeta)\big[1-\exp(-\zeta)\big]\,\sin^2(\Phi^{\mathrm{St}})\,. \qquad (9)$$

Здесь Φ^{St} — фаза, зависящая от вида адиабатических потенциалов в области между точкой квазипересечения и точками поворота (фаза Штюкельберга). Штюкельберг ссылается на работу Ландау [5], отмечая, что результаты последней справедливы только при $\zeta \ll 1$ и что в этом пределе Φ^{St} совпадает с Φ^{L}. Если выражение (9) усреднить по фазе (или, как принято говорить, по штюкельберговским осцилляциям) и затем сравнить его с выражением (7), то можно найти вероятность перехода при однократном прохождении по Штюкельбергу:

$$P^{\mathrm{St}} = \exp(-\zeta)\,. \qquad (10)$$

Как и следовало ожидать, ВКБ-приближение для вероятности перехода, найденное Штюкельбергом, совпадает с точной полуклассической вероятностью, полученной Зинером.

В совершенно другом контексте проблема узкого квазипересечения была рассмотрена Майораной — при исследовании динамики спина 1/2 в зависящем от времени магнитном поле, которое почти исчезает в некоторый момент [1]. Гамильтониан, описывающий эволюцию спина, был взят в виде

$$\hat{H}(t) = \gamma \dot{B}_z t \hat{s}_z + \gamma B_x \hat{s}_x\,, \qquad (11)$$

где γ — гиромагнитное отношение, а $\dot{B}_z$, B_x — не зависящие от времени параметры. Амплитуды вероятности двух спиновых функций в произвольный момент времени были представлены в виде контурных интегралов по вспомогательной переменной. В частности, амплитуда выживания f, выраженная в функции безразмерного времени $\tau \propto t$, имеет вид

$$f(\tau) = \frac{\sqrt{k}\exp(-k\pi/8)}{2(1+\mathrm{i})\sqrt{\pi}} \int_L s^{k/4\mathrm{i}-1} \exp\left(\frac{s^2}{8\mathrm{i}} + s\tau\right) \mathrm{d}s\,, \qquad (12)$$

где $k = \gamma B_x^2/(\hbar \dot{B}_z)$, L — должным образом выбранный контур интегрирования и f нормализовано так, что $|f(\tau)|^2_{\tau\to-\infty} = 1$. Асимптотическая вероятность выживания равна $|f(\tau)|^2_{\tau\to\infty}$, и вероятность неадиабатического перехода (т.е. вероятность переориентации спина по отношению к асимптотическому направлению магнитного поля) равна $P^{\mathrm{M}} = 1 - |f(\tau)|^2_{\tau\to\infty}$. Явное выражение для P^{M} таково:

$$P^{\mathrm{M}} = \exp\left(-\frac{\pi\gamma B_x^2}{\hbar \dot{B}_z}\right). \tag{13}$$

Теперь заметим, что гамильтониан в (11) подобен гамильтониану Зинера. При должной идентификации параметров $\gamma B_x = a$ и $\gamma \dot{B}_z = |F_1 - F_2| v_{\mathrm{c}}$ формула (13) принимает вид $P^{\mathrm{M}} = \exp(-\zeta)$, т.е. она совпадает с P^{LZ} и P^{St}. Сделаем два замечания по поводу формул (12) и (13). Во-первых, интеграл Майораны дает одно из интегральных представлений функции параболического цилиндра, что устанавливает связь с подходом Зинера. Во-вторых, выражение (12) получено в [1] без какой-либо связи со свойствами высших трансцендентных функций. Последнее позволяет предложить решение Майораны в качестве довольно простой задачи в учебнике по квантовой механике. До сих пор стандартная ссылка на вывод точного полуклассического выражения для вероятности перехода делалась на статью Зинера, которая недостаточно проста и кратка для обсуждения в учебнике. Поскольку $P^{\mathrm{LZ}} = P^{\mathrm{St}} = P^{\mathrm{M}}$, было бы логично называть выражение для вероятности неадиабатического перехода при однократном прохождении области квазипересечения формулой Ландау–Зинера–Штюкельберга–Майораны:

$$P^{\mathrm{LZStM}} = \exp\left(-\frac{2\pi a^2}{\hbar |F_1 - F_2| v_{\mathrm{c}}}\right). \tag{14}$$

К сожалению, имя Майораны никогда не упоминается в связи с формулой (14), хотя ее элегантный вывод прекрасно дополняет артистический вывод Ландау, стандартный подход Зинера и скрупулезный анализ Штюкельберга. Можно сказать, что пять работ в 1932 г. заложили основу различным методам в теории неадиабатических переходов: поиску решения в интегральном представлении, использованию аналитического продолжения классических динамических величин в комплексную плоскость, обращению к хорошо изученным высшим трансцендентным функциям и правильной трактовке явления Стокса при квазиклассическом анализе связанных волновых уравнений. Ссылки на соответствующие работы можно найти в обзоре [11] и сборнике [12].

Мы надеемся, что эта заметка частично устранит незаслуженное игнорирование работы Майораны [1] в современном изложении теории неадиабатических переходов (включая также и работы одного из авторов [11, 13]) и послужит небольшим дополнением к яркому описанию вклада Майораны в теоретическую физику в очерке Амальди [14].

Мы признательны Л.П. Питаевскому, обратившему наше внимание на тему этого сообщения и проявившему интерес к различным подходам в решении одной из задач теории неадиабатических переходов.

Список литературы

1. Majorana E *Nuovo Cimento* **9** 45 (1932)
2. Schwinger J *Phys. Rev.* **51** 648 (1937)
3. Rabi I I *Phys. Rev.* **51** 652 (1937)
4. Bloch F, Rabi I I *Rev. Mod. Phys.* **17** 237 (1945)
5. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Квантовая механика*: *Нерелятивистская теория* (М.: Наука, 1974)
6. Landau L D *Phys. Z. Sowjetunion* **1** 88 (1932)
7. Landau L D *Phys. Z. Sowjetunion* **2** 46 (1932)
8. Zener C *Proc. R. Soc. London Ser. A* **137** 696 (1932)
9. Stückelberg E C G *Helv. Phys. Acta.* **5** 369 (1932)
10. Whittaker E T, Watson G N *A Course of Modern Analysis* 4th ed. (Cambridge: Univ. Press, 1927)
11. Nikitin E E, in *Atomic, Molecular & Optical Physics Handbook* (Ed. G W F Drake) (Woodbury, NY: American Institute of Physics, 1996) p. 561; also in the forthcoming second edition of this book, 2005
12. Osherov V I, Ponomarev L I (Eds) *Nonadiabatic Transitions in Quantum Systems* (Chernogolovka: Institute of Problems of Chemical Physics Russ. Acad. of Sci., 2004)
13. Никитин Е Е, Уманский С Я *Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях* (М.: Атомиздат, 1979)
14. Amaldi E *La Vita e l'Opera di Ettore Majorana* (Roma: Accademia Nazionale dei Lincei, 1966)

Majorana formula and the Landau–Zener–Stuckelberg treatment of the avoided crossing problem

F.Di Giacomo
Department of Chemical Engineering and Materials, University of Rome "La Sapienza"
Via del Castro Laurenziano 7, I-00161 Rome, Italy
E.E.Nikitin
Max-Planck Institut für Biophysikalische Chemie, Tammannstrasse 6,
D-37077 Göttingen, Germany; Department of Chemistry,
Technion-Israel Institute of Technology, Haifa 32000, Israel

The Majorana formula for the probability of spin-flipping in a time-dependent magnetic field which almost vanishes at a certain moment is discussed at the background of the celebrated work by Landau, Zener and Stueckelberg on the nonadiabatic dynamics in the avoided crossing situation.

PACS numbers: **01.40.–d**, **01.65.+g**, **03.65–w**

Bibliography 14 references
Uspekhi Fizicheskikh Nauk **175** (5) 545–547 (2005)

Received 27 February 2005
Physics–Uspekhi **48** (5) (2005)