Univerza *v Ljubljani*
Fakulteta za *matematiko in fiziko*

Seminar 4. letnik

Analitično rešljivi dvonivojski sistemi v kvantni mehaniki

Tilen Knaflič

Mentor: prof. dr. Anton Ramšak

24. 9. 2012

Povzetek

V seminarju so predstavljene tri zgodovinske analitične rešitve dvonivojskih sistemov v kvantni mehaniki. S pomočjo numeričnega računanja teh istih enačb, se pokaže skladnost med analitično izračunano verjetnostjo prehoda in časovnim potekom verjetnostne gostote. Za konec se na kratko pove nekaj o novem pristopu k analitičnem reševanju teh sistemov.

Kazalo

1 Uvod

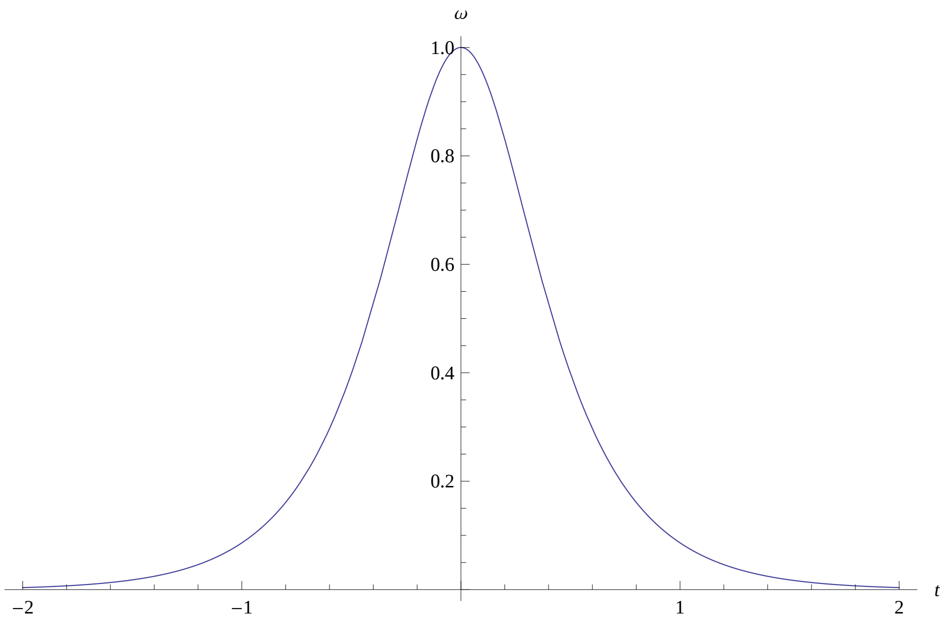
Sistem v kvantni mehaniki, ki je lahko v dveh stanjih je dvonivojski. Ponavadi gledamo kako na tak sistem vpliva neka motnja, recimo magnetno polje. Reševanje poteka numerično, le v redkih primerih pa imamo tako srečo, da se ga lahko reši analitično. Trije taki primeri, ki so praktično edini znani, so predstavljeni v tem seminarju. Lahko jim rečemo, da so zgodovinski, saj njihova obravnava sega v zgodnja trideseta leta prejšnjega stoletja. Tu bo govora večinoma o spinskih sistemih, ni pa nujno da gre vedno za spin. Lahko gre tudi za polarnost-nepolarnost molekul [1] ali kaj drugega. Reševanje poljubnega dvonivojskega sistema za verjetnostni amplitudi privede do diferencialne enačbe drugega reda, ki jo za poljuben hamiltonjan ne znamo rešiti analitično. Če pa ustrezno izberemo pravo motnjo, lahko dobimo kakšno znano enačbo, ki jo znamo rešiti. Vredno je omeniti, da je ta rešitev pogosto limitna ([1], [2]) in le redko dobimo celoten časovni potek verjetnostnih amplitud.

V vseh treh primerih se raziskuje verjetnost prehoda iz enega stanja v drugega. Tu je dobro poznati adiabatski teorem, ki pravi da če se sprememba hamiltonjana dogaja počasi, bo prišlo do prehoda. Z drugimi besedami, sistem lahko sledi spremembi hamiltonjana, če se ta dogaja počasi. Za primer se obrnimo na pomoč k stari dobri klasični mehaniki. Recimo da imamo neko idealno nihalo, obesek na vrvici pritrjen na nekem ogrodju, ki ga lahko prenašamo naokrog. Nihajni čas takega nihala je, kot že vemo $2\pi\sqrt{L/g}$, kjer je L dolžina vrvice in g težnostni pospešek. Potem pa se odločimo, da odnesemo to nihalo na Triglav, kamor si želimo že nekaj let. Ko se vzpenjamo, se spreminja okoliška temperatura in čisto malo tudi gravitacijski pospešek. Nihajni čas se zaradi tega spremeni v $2\pi\sqrt{L(t)/g(t)}$. Če nihalo nosimo zelo počasi in pazljivo, se bo uspešno prilagajalo spremembam dolžine in gravitacijskega pospeška. Res je, da bomo zaradi tega hodili na Triglav več dni, vendar bo nihajni čas nihala zato gladko prišel iz začetnega do končnega. Če ga bomo pa med potjo stresali, pa se bo nihajni čas porušil, morda se bo celo nihalo ustavilo. V kvantni mehaniki se to pove takole. Če imamo sistem v n-tem stanju začetnega hamiltonjana H_i in se hamiltonjan spreminja počasi, bo na koncu naš sistem v n-tem stanju končnega hamiltonjana H_f [3]. Povedano drugače to pomeni, da sistem sledi spremembi energije in se ji prilagaja. Pri vseh primerih, ki so opisani v tem seminarju, gre za počasne spremembe ravno z namenom, da se prehod zgodi. Človek se na tem mestu rad vpraša, če bi s temi prehodi lahko opisali tudi recimo absorbcijo fotona. Vendar se lahko hitro spomnimo, da se ta proces zgodi relativno hitro, tako da ne spada v to skupino.

Rad bi še omenil, da je adiabatski teorem v resnici limitni, torej ko se motnja spreminja neskončno dolgo. V realnosti tega ne moremo doseči, zato je veliko govora o neadiabatskih prehodih, ker se motnja zgodi s hitrostjo, ki je različna od nič. Ampak še vedno se motnja dogaja neskončno počasi, v primerjavi z našo časovno skalo. V primerih v tem seminarju, kjer imamo delec (elektron) v magnetnem polju, je neka naravna frekvenca za primerjavo časovne skale Larmorjeva frekvenca, $\omega = egB/2m$. Pri vseh mojih numeričnih izračunih je ta vrednost enaka 1 (naboj elektrona: $e = 1$, faktor $g = 2$, velikost magnetnega polja: $B = 1$, masa elektrona: $m = 1$), oziroma $1/2\pi$ če gledamo navadno frekvenco. Tako je naša primerjalna časovna skala oziroma značilni čas sistema $\tau' = 2\pi$.

2 Rosen-Zener [2]

Leta 1932, ko so vsi živahno izvajali Stern-Gerlachov eksperiment (v nadaljevanju označeno kot SG) na razne možne načine, se je zapletlo pri neujemanju Guettingerjeve teoretične napovedi in eksperimentom Phippsa in Sterna. Slednja namreč nista zaznala prehodov med stanji spina gor-dol, kot je napovedal Guettinger. Šlo je za eksperiment, kjer so s prvim preletom elektronov skozi SG določili njihvo spin in izbrali eno od lastnih vrednosti. Nato so te izbrance izpostavili rotirajočemu magnetnemu polju in potem poslali skozi še en SG, da so videli, če so dobili kakšne prehode. Če bi do njih res prišlo, bi morali na koncu dobiti dve piki, eno za spin gor in drugo za spin dol. Do tega ni prišlo. Ta problem sta podrobno proučila Rosen in Zener. Sklepala sta, da se lahko napaka v teoretični napovedi skriva v napačnem izboru rotacije magnetnega polja. Guettinger je predpostavil konstatno kotno hitrost, ki je seveda imela skok. Rosen in Zener pa sta se to odločila izboljšati s potekom kotne hitrosti, ki je prikazan na sliki 1.



Slika 1: Odvisnost kotne hitrosti vrtenja magnetnega polja od časa.

Glavna prednost take odvisnosti od Guettingerjeve je v tem, da je zvezna. Druga pomembna lastnost je pa ta, da se s takim spreminjanjem magnetnega polja da enačbe rešiti analitično. Funkcijska odvisnost kotne hitrosti je podana z enačbo:

$$\omega = 2\pi\nu_0 \cosh^{-1}\left(\pi\frac{t}{\tau}\right), \tag{2.1}$$

kjer sta konstanti ν_0 in τ izbrani tako, da velja

$$\Delta\theta = \int_{-\infty}^{\infty} \omega dt = 2\pi\nu_0\tau. \tag{2.2}$$

Tu $\Delta\theta$ predstavlja celoten kot zasuka magnetnega polja. Vidimo, da je izraz v okviru adiabatskega teorema, saj se motnja vklopi v $-\infty$ in izklopi v ∞, tako da dejansko traja neskončno dolgo. No kot bomo videli tudi kasneje, je pravi parameter trajanja motnje seveda τ.

2.1 Analitična rešitev

Kot je v kvantni mehaniki navada, tudi tukaj zapišemo in rešujemo Schroedingerjevo enačbo, $H\psi = i\hbar\dot{\psi}$. Rosen in Zener sta se odločila enačbe reševati v vrtečem koordinatnem sistemu, tako da se valovna funkcija vrti skupaj s poljem. Tako lahko zapišemo

$$\psi = C_1\psi_\alpha + C_2\psi_\beta, \tag{2.3}$$

kjer sta ψ_α in ψ_β Paulijeva spinorja za spin gor in dol, C_1 in C_2 oziroma kvadrat njune absolutne vrednosti, pa sta ustrezni verjetnostni amplitudi. V primeru vrtečega koordinatnega sistema skupaj s poljem, spin gor pomeni v smeri polja, dol pa v nasprotni smeri. Reševanje Schroedingerjeve enačbe nas pripelje do sistema dveh diferencialnih enačb prvega reda za C_1 in C_2:

$$\dot{C}_1 = i\frac{\omega}{2}e^{-iht}C_2, \tag{2.4}$$

$$\dot{C}_2 = i\frac{\omega}{2}e^{iht}C_1. \tag{2.5}$$

S simbolom h je predstavljena energijska razlika med nivojema gor-dol, ω pa ima obliko iz enačbe 2.1. Ta sistem se lahko prevede na diferencialno enačbo drugega reda za C_1:

$$\ddot{C}_1 + (ih - \frac{\dot{\omega}}{\omega})\dot{C}_1 + \left(\frac{\omega}{2}\right)^2 C_1 = 0. \tag{2.6}$$

Za začetne pogoje sta si zamislila, da je spin antiparalelen z magnetnim poljem, torej

$$|C_1(-\infty)|^2 = 0, \tag{2.7}$$

$$|C_2(-\infty)|^2 = 1. \tag{2.8}$$

Zanimalo ju je seveda, kolikšen delež elektronov doživi prehod. Verjetnost za to sta definirala kot

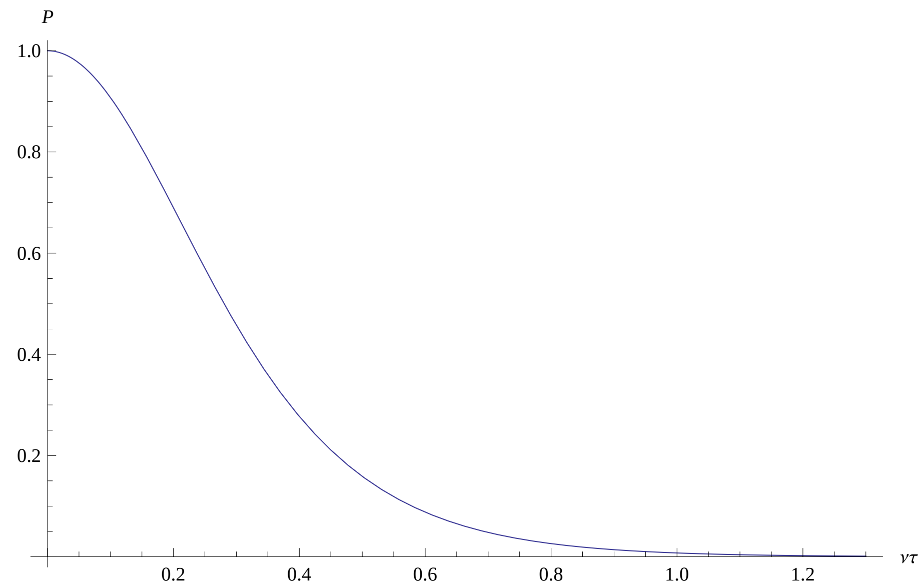
$$P = |C_1(\infty)|^2. \tag{2.9}$$

Na tem mestu bi rad še enkrat opozoril, da je to definirano v vrtečem sistemu. Torej P nam predstavlja verjetnost, da se spin poravna s poljem, če je bil prej obrnjen v nasprotni smeri.

Po tem ko sta enačbo 2.6 prevedla na hipergeometrično, uvedla nekaj substitucij in upoštevala začetne pogoje 2.7 ter 2.8, sta dobila rezultat:

$$P = \sin^2\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right)\cosh^{-1}(\pi\tau\nu), \tag{2.10}$$

kjer je ν povezan z energijsko razliko h. Najprej opazimo, da je verjetnost odvisna od kota zasuka polja. Zanimivi so večkratniki števila π, saj pri teh dobimo izmenično vrednosti 0 in 1. Drugi del izraza je nazorno prikazan na sliki 2.



Slika 2: Verjetnost za prehod v vrtečem sistemu, da se spin, ki je bil na začetku antiparalelen magnetnemu pojlu poravna s s poljem.

Za dani problem je ν konstanten, spreminja se le τ. Vidimo, da ima za majhne τ ta del izraza vrednost 1, za velike pa pade na 0. Najlažje je to predstaviti na konkretnem primeru. Imejmo torej spin v nasprotni smeri magnetnega polja. Potem pa zavrtimo magnetno polje recimo za kot π. Sinus v izrazu za P nam da vrednost 1, tako da je verjetnost za prehod v celoti odvisna od drugega dela, oziroma od značilnega časa motnje, τ. Če je ta čas zelo kratek, nam da izraz vrednost 1, torej smo dobili prehod, ali pač? Že v uvodu smo se naučili, da če se motnja zgodi hitro (kratek τ), sistem ne zmore slediti in tako se nam prehod ne zgodi. Kaj je sedaj prav, se vprašamo? Adiabatski teorem seveda drži. Pomembno je, da se zopet spomnimo, kaj nam točno predstavlja ta verjetnost. P je verjetnost za prehod v vrtečem sistemu, da se spin, ki je bil na začetku antiparalelen magnetnemu polju poravna z njim. Torej je vse v redu. Da si lažje predstavljajmo recimo, da polje na začetku kaže v smeri z, spin pa v $-z$. Ker je bil τ kratek, pri obratu polja za kot π sistem ni uspel slediti in je spin ostal enak kot pred zasukom, torej dol. V fiksnem koordinatnem sistemu do prehoda torej ni prišlo. Če pa pogledamo z vidika magnetnega polja, pa se je prehod seveda zgodil, tako kot nam pove tudi izraz za P. Prej je bil spin dol, glede na polje, potem pa smo polje tako hitro zavrteli, da spin ni uspel slediti in smo ga ujeli v smeri $-z$, tako da je bil na koncu spin poravnan z magnetnim poljem. Če bi bil pa τ velik, bi sistem uspešno sledil spremembam in spin bi ostal vedno antiparalelen z magnetnim poljem, torej v vrtečem sistemu nebi bilo prehoda. Da se v fiksnem sistemu zgodi prehod pri velikem značilnem času motnje, pa je seveda pomembno, za kakšen kot ga zavrtimo. Zanimivi so seveda samo koti π, 2π,... Pri teh kotih se verjetnost za prehod v fiksnem sistemu zapiše kot

$$\tilde{P} = 1 - \sin^2\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right)\cosh^{-1}(\pi\tau\nu). \tag{2.11}$$

2.2 Numerična rešitev

Zanimivo si je pogledati, ali se analitični izračun ujema z numeričnim. V ta namen sem napisal program v *Mathematici* in pripravil nekaj zanimivih slik. Privzel sem, da se magnetno polje vrti v xz ravnini in da na začetku kaže polje v z smeri. Spin je antiparalelen s poljem, torej imam enake začetne pogoje kot v članku, 2.7 in 2.8. Razlika je le v tem, da sem jaz vseskupaj računal v fiksnem koordinatnem sistemu, tako da sta C_1 in C_2 sedaj komponenti spina gor in dol glede na z os. Začetni pogoji so takšni, da je sistem v lastnem stanju hamiltonjana, ki sem ga zapisal kot

$$H = \frac{J_x}{2}\sigma_x + \frac{J_z}{2}\sigma_z, \tag{2.12}$$

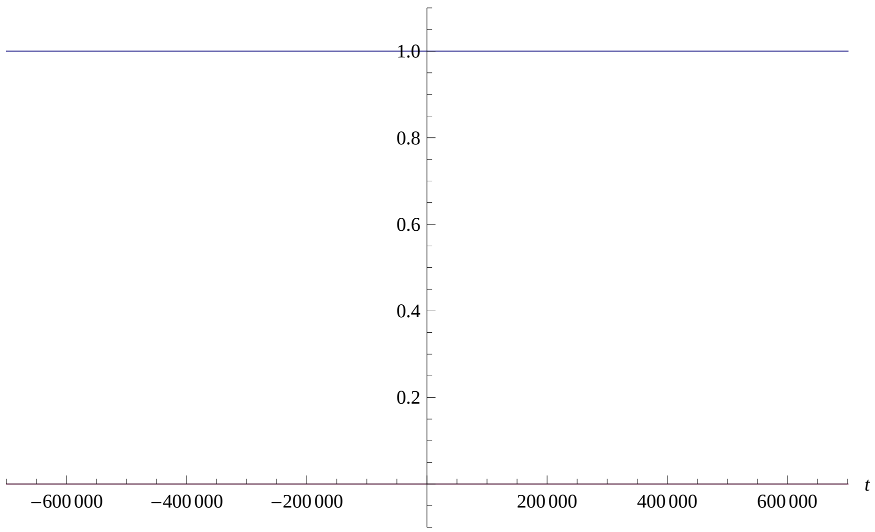
kjer sta σ_x in σ_z Paulijevi matriki in J_x in J_z pa x in z komponenti magnetnega polja

$$J_z = J_0\cos(\omega t + \phi), \tag{2.13}$$

$$J_x = J_0\sin(\omega t + \phi). \tag{2.14}$$

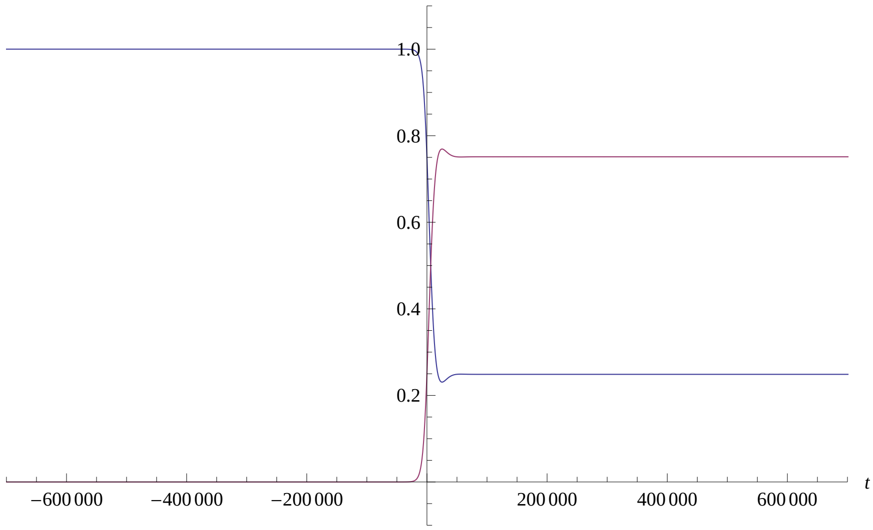
Kotna hitrost ω se seveda spreminja enako kot prej, 2.1.

Risal sem grafe verjetnostnih amplitud v odvisnosti od časa pri kotih, ki so večkratniki števila π. Pri teh kotih je verjetnost za prehod podana z enačbo 2.11. Poglejmo, če se stvari ujemajo.



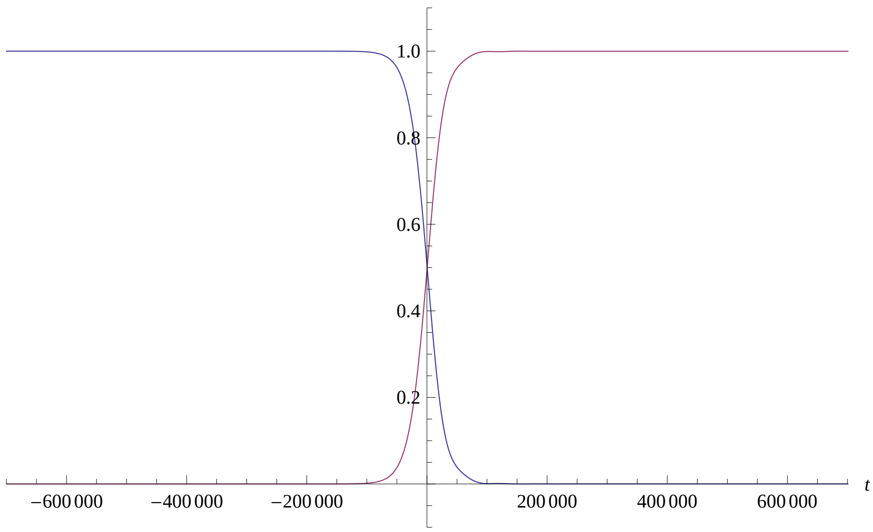
Slika 3: Časovni potek verjetnostnih amplitud za spin gor (rdeča) in spin dol (modra) za $\tau \simeq 0.1$ in $\Delta\theta = \pi$.

Kot se lepo vidi na sliki 3, za $\tau \simeq 0.1$ ne dobimo prehoda. Motnja se zgodi prehitro glede na naš značilni čas sistema τ' in sistem se niti ne zgane. Če $\tau \simeq \tau'$ kot na sliki 4, se sistem že malo spremeni, ampak je značilni čas motnje še vedno prekratek, da bi mu sistem lahko uspešno sledil.



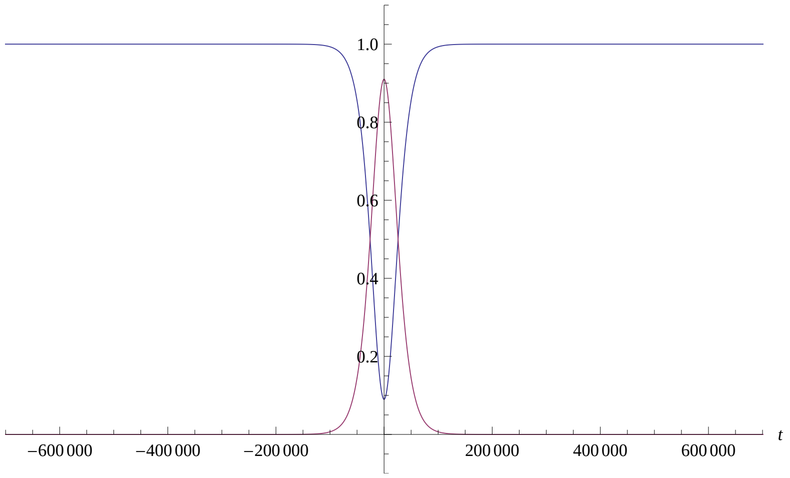
Slika 4: Časovni potek verjetnostnih amplitud za spin gor (rdeča) in spin dol (modra) za $\tau \simeq \tau'$ in $\Delta\theta = \pi$.

Šele ko $\tau \gg \tau'$, se nam zgodi lep prehod (slika 5). Pri zasuku polja za kot π smo pri počasni motnji obrnili spin iz dol v gor glede na z os.



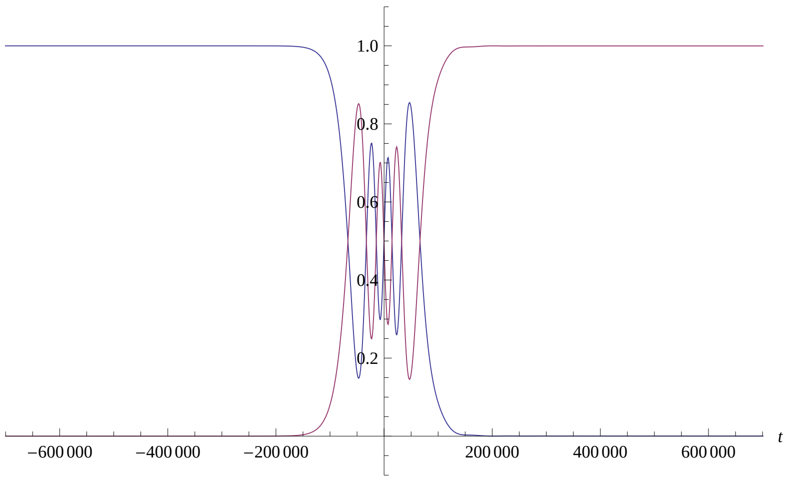
Slika 5: Časovni potek verjetnostnih amplitud za spin gor (rdeča) in spin dol (modra) za $\tau \gg \tau'$ in $\Delta\theta = \pi$.

Če se odločimo obrniti polje za kot 2π, pa ne dobimo prehoda. Sistem sicer lepo sledi motnji, vendar ga pripeljemo nazaj v začetni položaj. Časovni potek tega obrata je prikazan na sliki 6.



Slika 6: Časovni potek verjetnostnih amplitud za spin gor (rdeča) in spin dol (modra) za $\tau \gg \tau'$ *in* $\Delta\theta = 2\pi$.

Seveda vemo, da če bo večkratnik števila π lih, bomo pri velikem τ dobili prehod, če bo sod pa ne. Samo kot primer navajam sliko 7, kjer je polje obrnjeno za kot 7π. Vidi se, da pride do prehoda, vendar imamo okoli časa 0 neko živahno dogajanje. To je samo posledica dobrega sledenja sistema motnji, ko ta napravi več obratov, preden se ustavi. Spomnimo se, da je analitični izraz za verjetnost definiran v neskončnosti. Numerično seveda ne moremo računati v neskončnost, ampak že zelo velika števila v primerjavi s τ zadoščajo. Iz vseh teh slik se vidi odlično ujemanje med analitičnim in numeričnim izračunom.



Slika 7: Časovni potek verjetnostnih amplitud za spin gor (rdeča) in spin dol (modra) za $\tau \gg \tau'$ *in* $\Delta\theta = 7\pi$.

3 Landau-Zenerjeva limita [1]

Po uspešnem sodelovanju s kolegom Rosen-om, se je Zener lotil računanja neadiabatskih prehodov. Bolj natančno se je posvetil prečkanju energijskih nivojev iz polarnega v nepolarno stanje molekule, ali obratno. Neodvisno je podobne probleme študiral tudi Lev Landau in prišel do enakega rezultata kot Zener. Zato se tej limiti za neadiabatske prehode reče tudi Landau-Zenerjeva limita. Neadiabatski se jim reče samo zato, ker je hitrost spreminjanja motnje neničelna, kot bi zahtevala teoretična adiabatska limita. Vseeno pa se iz vrednosti za verjetnost prehoda lepo vidi, da hitrost igra pomembno vlogo. Če je majhna se prehod zgodi, če je hitra pa ne. Vse je v skladu z adiabatskim teoremom.

Podobno kot v prejšnjem članku se je tudi na tem mestu spomnil izbrati poseben koordinatni sistem, nekaj analognega vrtečemu sistemu. V primeru polarnosti molekul namreč težko govorimo o vrtečem sistemu. Tako si je izbral funkciji ϕ_1 in ϕ_2, ki predstavljata polarno in nepolarno stanje, C_1 in C_2 pa sta spet ustrezna deleža. V fiksnem sistemu, če mu lahko tako rečemo, si namreč obe lastni funkciji izmenjujeta polarno-nepolarno karakteristiko. V tem seminarju se v to ne bom preveč poglabljal. Poglejmo si raje predpostavke in enačbe, ki jih je reševal. Funkciji ϕ_1 in ϕ_2 zadoščata enačbama

$$H\phi_1 = \varepsilon_1\phi_1 + \varepsilon_{12}\phi_2, \tag{3.1}$$

$$H\phi_2 = \varepsilon_{12}\phi_1 + \varepsilon_2\phi_2. \tag{3.2}$$

ε_1 in ε_2 sta kot neki energiji polarnega in nepolarnega stanja molekule, ε_{12} je pa energijska razlika med stanjema. Na tem mestu je dobro omeniti, da za razliko od stanj spina gor-dol, energijska razlika na veliki skali ni konstantna. Prav zaradi tega Zener uvede predpostavke, da je območje prehoda zadosti majhno, da je ta razlika neodvisna od časa, prav tako funkciji ϕ_1 in ϕ_2. Druga predpostavka pa je, da lahko $\varepsilon_1 - \varepsilon_2$ obravnavamo kot linearno funkcijo časa. Imamo torej:

$$\varepsilon_1 - \varepsilon_2 = \alpha t, \tag{3.3}$$

$$\dot{\varepsilon_{12}} = \dot{\phi_1} = \dot{\phi_2} = 0. \tag{3.4}$$

Iz tega skupka pride do enakih enačb za C_1 in C_2 kot v prejšnjem članku:

$$\dot{C_1} = i\varepsilon_{12}e^{-i\int(\varepsilon_1-\varepsilon_2)dt}C_2, \tag{3.5}$$

$$\dot{C_2} = i\varepsilon_{12}e^{i\int(\varepsilon_1-\varepsilon_2)dt}C_1. \tag{3.6}$$

Začetni pogoji so identični kot v enačbah 2.7 in 2.8. To pomeni, da je na začetku molekula v nepolarnem stanju. Enačbi 3.5 in 3.6 se da seveda prevesti na diferencialno enačbo drugega reda za C_1. Zener je potem to enačbo drugega reda predelal na znano Weberjevo enačbo, za katero poznamo rešitve. To so Weberjeve funkcije D. S še nekaj substitucijami in limitami je prišel do znanega izraza za verjetnost prehoda:

$$P = e^{-2\pi\gamma}, \tag{3.7}$$

kjer je

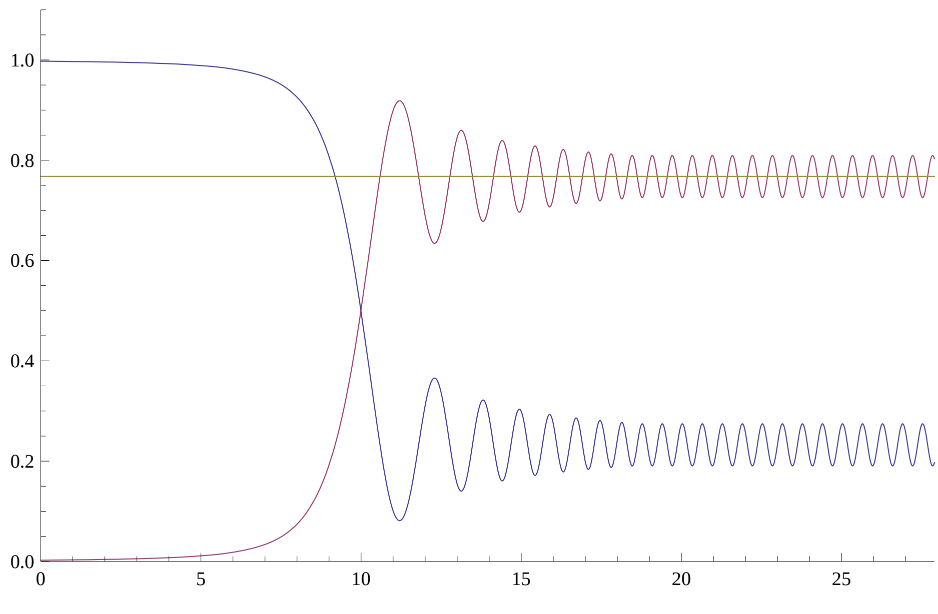
$$\gamma = \frac{\varepsilon_{12}^2}{|\alpha|}. \tag{3.8}$$

To se seveda nanaša na funkciji ϕ_1 in ϕ_2 in na njun sistem, tako da je, podobno kot pri vrtečem sistemu, dejanska verjetnost prehoda $\tilde{P} = 1 - P$.

α nam torej predstavlja neko hitrost spremembe, motnje. Pa poglejmo dva skrajna primera. Če je $\alpha \ll 1$, potem $P \to 0$ in $\tilde{P} \to 1$. Za majhne hitrosti motnje je torej verjetnost za prehod enaka 1, kar je v sladu z adiabatskim teoremom. Ko pa je $\alpha \gg 1$, potem gre pa $P \to 1$ in $\tilde{P} \to 0$. Za velike hitrosti spreminjanja torej sistem ne sledi in do prehoda ne pride.

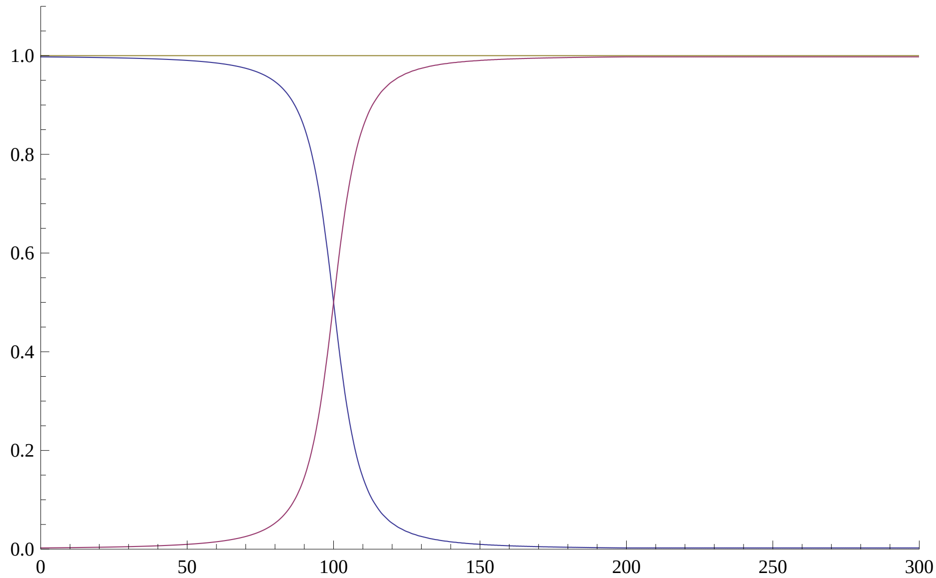
Samo za ilustracijo sem na podoben način kot prej numerično izračunal časovni potek verjetnostnih amplitud. Dovolil sem si, da sem namesto obravnave polarnosti-nepolarnosti molekul spet reševal sistem za spin gor-dol. Polje v z smeri se je spreminjalo linearno od recimo $-J_0$ do J_0, polje v x smeri pa je bilo konstantno, enako kot za $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ in ε_{12}. V mojem primeru je torej ε_{12} ustrezal konstantnemu polju v x smeri in $\varepsilon_1 - \varepsilon_2$ linearno naraščajočemu magnetnemu polju v z smeri. Na tem mestu bi rad opomnil, da bi za povsem enake enačbe moral zamenjati vlogi x in z smeri, vendar s tem nič ne spremenimo, samo malo drugače je koordinatni sistem obrnjen.

Za hitre spremembe polja sem dobil enak rezultat kot na sliki 3. Do prehoda ni prišlo. Pri nekih vmesnih vrednostih, torej recimo tam nekje, kjer je približno veljalo $\gamma \simeq 1$, sem dobil stanje, kot ga prikazuje slika 8. Zraven sem še narisal vrednost verjetnosti za prehod $\tilde{P}$. Kot pričakovano, se je ujemala z verjetnostno amplitudo $|C_1|^2$. Začetno stanje je bilo zopet lastno stanje hamiltonjana, spin dol.



Slika 8: Časovni potek verjetnostnih amplitud za spin gor (rdeča) in spin dol (modra) ter vrednost verjetnosti za prehod (zelena) pri $\gamma \simeq 1$.

Za počasno spreminjanje polja, pa sem po pričakovanjih dobil lep prehod, ki je prikazan na sliki 9.



Slika 9: Časovni potek verjetnostnih amplitud za spin gor (rdeča) in spin dol (modra) ter vrednost verjetnosti za prehod (zelena) pri $\gamma \simeq 0$.

Spet se kaže odlično ujemanje med vrednostjo verjetnosti za prehod ter verjetnostno amplitudo $|C_1|^2$. Ti numerični izračuni torej dobro potrjujejo analitično izračunano limito verjetnosti za prehod.

V svojem članku je Zener tudi omenil, da je Landau prišel do te limite malo pred njim, vendar ga je popravil, da se je pri faktorju v eksponentu zmotil za faktor 2π.

4 Rabijev problem [4]

Študiranje prehodov sistemov, ki so izpostavljeni magnetnemu polju nagnjenemu za kot θ glede na z os in precedirajo okoli nje s kotno hitrostjo ω, je bilo leta 1937 med drugim tudi Rabijevo delo. Zanimala ga je, tako kot druge, verjetnost za prehod. Obetal si je, da bodo dobljene verjetnosti dobro orodje za ugotavljanje predznaka magnetnega momenta. Lotil se je reševanja Schroedingerjeve enačbe s hamiltonjanom:

$$H = g(\mu_0/2)(\sigma_x J_x + \sigma_y J_y + \sigma_z J_z), \tag{4.1}$$

kjer je g Lande-jev faktor, μ_0 Bohrov magneton, $J_{x,y,z}$ pa ustrezne komponente magnetnega polja. Valovno funkcijo v fiksnem koordinatnem sistemu zapišemo kot $\psi = C_{\frac{1}{2}}\psi_{\frac{1}{2}} + C_{-\frac{1}{2}}\psi_{-\frac{1}{2}}$. Tukaj spin gor pomeni v smeri z osi, dol pa v nasprotni smeri. S tem zapisom iz Schroedingerjeve enačbe dobimo:

$$\dot{C}_{\frac{1}{2}} = (-ig\mu_0/2\hbar)[J_z C_{\frac{1}{2}} + (J_x - iJ_y)C_{-\frac{1}{2}}], \tag{4.2}$$

$$\dot{C}_{-\frac{1}{2}} = (-ig\mu_0/2\hbar)[-J_z C_{-\frac{1}{2}} + (J_x + iJ_y)C_{\frac{1}{2}}]. \tag{4.3}$$

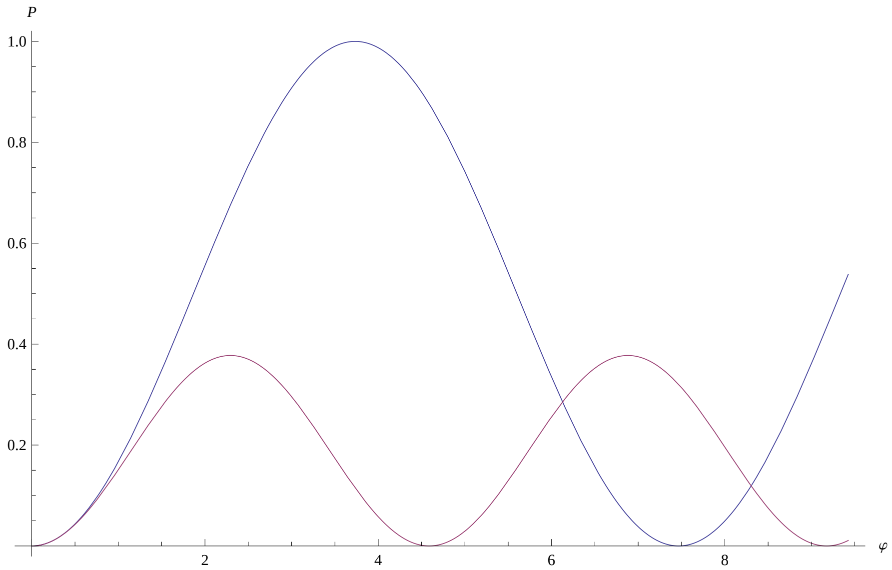
Magnetno polje J je nagnjeno po kotom θ glede na z os, in se ne spreminja s časom, tako kot se kot $\varphi = \omega t$, polarni kot v xy ravnini. Tako lahko komponente magnetnega polja zapišemo kot $J_x = J \sin\theta \cos\varphi$, $J_y = J \sin\theta \sin\varphi$ in $J_z = J\cos\theta$. Na tem mestu je avtor članka uvedel nekaj substitucij in vseskupaj pretransformiral v vrteč koordinatni sistem. V tem primeru je pa res bolj smiselno gledati verjetnost v vrtečem sistemu, saj spin nikoli ni poravnan z z osjo. Predpostavil je, da je na začetku sistem v lastnem stanju hamiltonjana, torej da kaže spin gor, glede na nagnjen vrteč sistem, oziroma glede na magnetno polje. Računal je verjetnost, da se spin obrne dol, glede na polje. Dobro je vedeti, da za razliko od prejšnjih dveh člankov, ki sta limitna, v tem primeru avtor dejansko izračuna časovni potek verjetnostnih amplitud in s pomočjo tega dobi tudi časovni potek same verjetnosti za prehod,

$$P = \sin^2(\frac{1}{2}\varphi \sin\theta). \tag{4.4}$$

To zadnjo obliko verjetnosti za prehod se dobi, če se še dodatno uglasi velikost magnetnega polja in kot nagiba. Ta verjetnost nam da kar precej proste roke. Vidi se namreč, da lahko dobimo izraz poljubno blizu 1, če le dobro nastavimo pogoje eksperimenta, torej celoten kot zasuka, φ. Enačba 4.4 velja v primeru negativnega magnetnega momenta. Če pa je magnetni moment pozitiven, se verjetnost zapiše kot:

$$P = \frac{\sin^2\theta}{1 + 3\cos^2\theta} \sin^2\left[\frac{\varphi}{2}(1 + 3\cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\right]. \tag{4.5}$$

Že iz same enačbe se vidi, da je ta druga verjetnost manjša od prve. Tako imamo kvalitativen način, da ločimo predznak magnetnega momenta, če le pazimo na smer vrtenja. Razliko med verjetnostima prikazuje slika 10.



Slika 10: Verjetnost v odvisnosti od kota zasuka za prehod iz spina gor v spin dol glede na rotirajoče magnetno polje za negativen (modra) in pozitiven (rdeča) magnetni moment, pri kotu $\theta = 1$.

Rabi je tako s tem dodal še en analitično rešljiv dvonivojski sistem v zbirko. Kot dodatek pa ima ta rešitev še možnost ugotavljanja predznaka magnetnega momenta. Uporabnost tega njegovega rezultata pa bolj pride do izraza v njegovem članku leto kasneje, kjer so tlakovali pot za razvoj jedrske magnetne resonance [5].

5 Nov pristop k iskanju analitičnih rešitev [6]

V letu pisanja tega seminarja sta dva fizika, Barnes in Sarma, odkrila nov pristop k iskanju analitičnih rešitev dvonivojskih sistemov v kvantni mehaniki. Ker je zadeva še zelo sveža, se seveda ne ve, koliko novih rešitev bo ponudila in če bodo sploh uporabne. Se mi pa že zaradi zanimivosti pristopa zdi vredno na kratko opisati to novost. Izkaže se, da je izbor rešitev pogojen z eno funkcijo $q(t)$, za katero so znani začetni pogoji.

Poglejmo si sedaj na kratko pot, ki je avtorja pripeljala do tja. Začela sta s splošnim hamiltonjanom za dvonivojski sistem, kateremu se z komponenta magnetnega polja spreminja s časom, x je pa konstantna:

$$H = \frac{J(t)}{2}\sigma_z + \frac{h}{2}\sigma_x. \tag{5.1}$$

Tu lahko h smatramo kot energijsko razliko med nivojema. Kot že mnogi pred njima, sta se tudi onadva prestavila v vrteč sistem in tam zapisala sistem enačb, ki sta ga prevedla na diferencialno enačbo drugega reda za C_1:

$$\ddot{C}_1 + (-i\hbar - \dot{J}/J)\dot{C}_1 + (J^2/4)C_1 = 0. \tag{5.2}$$

Na tem mestu pa sta naredila njun čudovit premislek. Namesto da bi to enačbo gledala kot diferencialno enačbo drugega reda za C_1, sta jo obravnavala kot enačbo prvega reda za $J(t)$. Torej delala sta se, kot da ne poznata časovnega poteka magnetnega polja. Izkaže pa se, da je ta enačba analitično rešljiva za nek poljuben C_1. Za začetne pogoje sta si izbrala $C_1(0) = C_2(0) = 1/\sqrt{2}$. Tako sta preko nekaj substitucij in integracij prišla do naslednje zveze za $J(t)$:

$$J = \frac{\ddot{q} + h^2 q}{\sqrt{h^2(1-q^2) - \dot{q}^2}}. \tag{5.3}$$

Začetni pogoji pa se za funkcijo $q(t)$ zapišejo kot

$$q(0) = 1, \qquad \dot{q}(0) = 0, \qquad \ddot{q}(0) = -h^2, \tag{5.4}$$

dodatno pa mora veljati še

$$\dot{q}^2 \leq h^2(1-q^2). \tag{5.5}$$

Na koncu sta torej izračunala pogoje za funkcijo $q(t)$ iz katere potem lahko izračunamo polje $J(t)$. Povedano drugače, če nam uspe najti tako funkcijo $q(t)$, ki zadošča pogojem 5.4 in 5.5, potem lahko izračunamo polje $J(t)$, za katerega imamo analitično rešitev na dlani. Seveda pa je možno s pomočjo nekaterih drugih enačb iz funkcije $q(t)$ izračunati časovni potek verjetnostnih amplitud in s pomočjo teh študirati, ali dobimo prehod ali ne, oziroma če dobimo tak časovni potek kot si ga želimo. Iskanje analitičnih rešitev za dvonivojski sistem v kvantni mehaniki se prevede na iskanje pravega q, ki nam bo dal pravi J in ustrezen časovni potek verjetnostnih amplitud. Pri teh stvareh je dostikrat tako, da si želimo imeti neko obliko polja, ali pa želimo imeti tako polje, da dobimo prehod, lahko pa tudi kaj drugega. Želja je lahko neskončno. Ta pristop vsekakor ponuja nov pogled na analitično reševanje teh sistemov, če bo prinesel kaj res uporabnega, bomo pa morali še malo počakati.

6 Zaključek

V seminarju so bile predstavljene tri zgodovinske analitične rešitve dvonivojskih sistemov v kvantni mehaniki, ki predstavljajo temelj v analitično rešljivih dvonivojskih sistemih in so praktično edine znane. Navidez enostaven problem sistema dveh diferencialnih enačb se izkaže za težko rešljivega v analitičnem smislu. Ravno to je bila glavna motivacija za ta seminar, saj se mi zdi zanimivo, da si po vsem tem času še nismo postregli z novimi rešitvami. Nekaj novega nam sicer ponuja nov pristop k iskanju analitičnih rešitev, opisan v zadnjem poglavju, vendar se mi zdi, da potrebuje še nekaj časa. Poleg teh treh zgodovinskih rešitev obstajajo tudi razne izpeljanke.

Nekaj primerov sem podprl z numeričnimi izračuni, ki so pokazali popolno ujemanje s teoretičnimi napovedmi. Za nek poljuben problem v dvonivojskih sistemih je ponavadi treba poseči po numeriki, vendar se to v bližnji prihodnosti lahko spremeni.

V podrobnosti izpeljav vseh štirih primerov se nisem spuščal, saj se mi zdi, da nimajo velikega pedagoškega pomena. Za bralce ki jih zanima več, predlagam da si pogledajo dejanske članke in smatrajo ta seminar kot pomoč pri razumevanju.

7 Literatura

[1] C. Zener, *Non-Adiabatic Crossing of Energy Levels* (Proceedings of the Royal Society A vol. 137, 696-702, 1932)

[2] N. Rosen, C. Zener, *Double Stern-Gerlach Experiment and Related Collision Phenomena* (Physical Review vol. 40, 502-507, 1932)

[3] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Prentice Hall, Inc., Upper Saddle River, 1995)

[4] I. I. Rabi, *Space Quantization in a Gyrating Magnetic Field* (Physical Review vol. 51, 652-654, 1937)

[5] I. I. Rabi, J.R. Zacharias, S. Millman, P. Kusch, *A New Method of Measuring Nuclear Magnetic Moment* (Physical Review vol. 53, 318-327, 1938)

[6] E. Barnes, S. D. Sarma, *Analytically solvable driven time-dependent two-level quantum systems* (Physical Review Letters vol. 109, 1-5, 2012)