Landau-Zener モデルの転送行列

July 2009, Y. Kayanuma

I. LANDAU-ZENER モデル

計算の便宜上、Fig.1 のように状態 $|1\rangle$ が上から下に交差する場合を考える。$v > 0, \hbar = 1$ として

$$i\frac{d}{dt}c_1 \;=\; -\frac{vt}{2}c_1 + \Delta c_2, \tag{1}$$
$$i\frac{d}{dt}c_2 \;=\; \Delta c_1 + \frac{vt}{2}c_2. \tag{2}$$

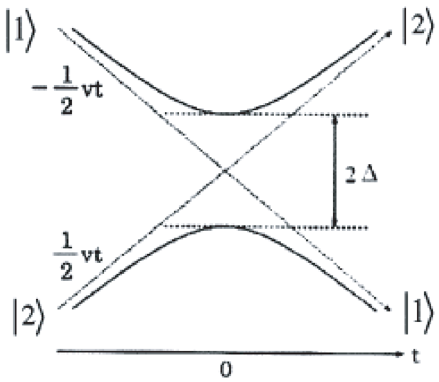

FIG. 1: 2 準位の交差

(1),(2) の両辺を t で微分して (1),(2) を代入することで

$$\frac{d^2}{dt^2}c_1 + \{(\Delta^2 - i\frac{v}{2}) + \frac{1}{4}v^2t^2\}c_1 \;=\; 0, \tag{3}$$
$$\frac{d^2}{dt^2}c_2 + \{(\Delta^2 + i\frac{v}{2}) + \frac{1}{4}v^2t^2\}c_2 \;=\; 0. \tag{4}$$

$z = i\sqrt{v}e^{i\frac{\pi}{4}}t, z^2 = -ivt^2$ と変数変換して $c_1(t) \equiv w_1(z)$, $c_2(t) \equiv w_2(z)$ とおけば

$$\frac{d^2}{dt^2} = -iv\frac{d^2}{dz^2}$$

に注意して (3), (4) は

$$\frac{d^2}{dz^2}w_1 + (n + \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4})w_1 \;=\; 0, \tag{5}$$
$$\frac{d^2}{dz^2}w_2 + (n - \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4})w_2 \;=\; 0, \tag{6}$$

と変形できる。ただし、$n = i(\Delta^2/v) \equiv i\delta$.

II. WEBER 関数による解

(5) の解は Weber 関数 $D_n(z), D_n(-z), D_{-n-1}(iz), D_{-n-1}(-iz)$ で与えられる。ただし、このうち 2 つが 1 次独立。実際、$D_n(z)$ が解であれば、残りの 3 つも解となることは代入して直ちに確かめられる。これらの中から適当な初期条件を満足するものを選ぶ。そのために Weber 関数の $|z| \to \infty$ における漸近挙動を調べる。

領域１．$|\arg z| < 3\pi/4$

$D_n(z) \to e^{-z^2/4} z^n,$

領域２．$-5\pi/4 < \arg z < -\pi/4$

$D_n(z) \to e^{-z^2/4} z^n - \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-n)} e^{-in\pi} e^{z^2/4} z^{-n-1},$

領域３．$\pi/4 < \arg z < 5\pi/4$

$D_n(z) \to e^{-z^2/4} z^n - \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-n)} e^{in\pi} e^{z^2/4} z^{-n-1}.$

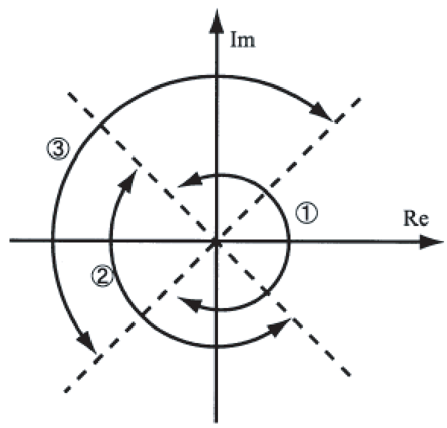

FIG. 2: Weber 関数の Stokes 線

初期条件

$$\lim_{t\to-\infty} |c_1(t)| = 1, \quad \lim_{t\to-\infty} |c_2(t)| = 0$$

を満たす解を求めよう。$z = i\sqrt{v} e^{i\frac{\pi}{4}} t$ より $t < 0$ では $z \in$ 領域１ であることに注意すれば、

$$w_1(z) \simeq D_1(z), \quad w_2(z) \simeq D_{n-1}(z)$$

ととれる。実際、$n = i\delta$（純虚数）だから $t \to -\infty$ で

$$D_n(z) \simeq e^{-z^2/4} z^n, \quad (|w_1| \to 1), \tag{7}$$

$$D_{n-1}(z) \simeq e^{-z^2/4} z^{n-1}, \quad (|w_1| \to 0) \tag{8}$$

また、$D_{n-1}(z)$ が (6) の解になっていることは明らか。

そこで、

$$w_1(z) = A D_n(z), \qquad w_2(z) = B D_{n-1}(z)$$

とおいて (1) から導かれる式

$$(\frac{d}{dz} + \frac{z}{2}) w_1(z) = -e^{-i\pi/4} \frac{\Delta}{\sqrt{v}} w_2(z) \tag{9}$$

に代入し、Weber 関数の公式

$$(\frac{d}{dz} + \frac{z}{2}) D_n(z) = n D_{n-1}(z) \tag{10}$$

と比較することにより

$$B = \sqrt{\delta} e^{-i\pi/4} A \qquad (\delta = \Delta^2/v) \tag{11}$$

が求められる。

$t \to -\infty$ では、$z = \sqrt{v}e^{-i\pi/4}|t|$ だから

$$e^{-z^2/4} = e^{ivt^2/4}$$

$$z^n = \exp(i\delta \log z) = \exp\bigl[i\delta\{\log\sqrt{v}|t| - i\pi/4\}\bigr]$$

より

$$\lim_{t\to-\infty} c_1(t) \;=\; A\exp\bigl[ivt^2/4 + \pi\delta/4 + i\delta\log\sqrt{v}|t|\bigr], \tag{12}$$

$$\lim_{t\to-\infty} c_2(t) \;=0. \tag{13}$$

また、$t \to \infty$ では、$z = \sqrt{v}e^{i3\pi/4}t$ だから $z \in$ 領域 3　で

$$z^n = \exp(i\delta \log z) = \exp\bigl[i\delta\{\log\sqrt{v}t + i3\pi/4\}\bigr]$$

より

$$\lim_{t\to\infty} c_1(t) \;=\; A\exp\bigl[ivt^2/4 - 3\pi\delta/4 + i\delta\log\sqrt{v}t\bigr] \tag{14}$$

$$\begin{aligned}\lim_{t\to\infty} c_2(t) \;&=\; -B\frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(1-i\delta)}\exp\bigl[(i\delta-1)i\pi - ivt^2/4 + 3\pi\delta/4 - i\delta\log\sqrt{v}t\bigr] \\ &=\; A\frac{\sqrt{2\pi\delta}}{\Gamma(1-i\delta)}\exp\bigl[-i\pi/4 - \pi\delta/4 - ivt^2/4 - i\delta\log\sqrt{v}t\bigr]\end{aligned} \tag{15}$$

(12),(14),(15) が $t = -\infty$ から $t = \infty$ への散乱行列要素を与える。この中には時間とともに激しく振動する位相成分が含まれている。知りたいのは準位交差の直前と直後を結ぶ転送行列である。これを求めるために、ここで得た解を「WKB 近似解」と比較して位相を決定する。

III.　WKB 近似解との比較

(1),(2) に戻り、$|t| \to \infty$ における漸近解の位相因子を求める。断熱エネルギーが $E(t) = \pm\sqrt{\Delta^2 + v^2t^2/4}$ で与えられることに注意して、位相因子

$$\int_0^t \sqrt{\Delta^2 + v^2t^2/4}dt = X\sqrt{X^2+\delta} + \delta\log|X + \sqrt{X^2+\delta}| - \delta\log\sqrt{\delta}, \quad (X = \sqrt{v}t/2)$$

の $|t| >> \Delta/v$ における漸近形 χ を求める。簡単な計算から $t \to \infty$ では

$$\int_0^t \sqrt{\Delta^2 + v^2t^2/4}dt = \chi = \frac{v^2t^2}{4} + \frac{\delta}{2}(1 - \log\delta) + \delta\log\sqrt{v}|t|. \tag{16}$$

また、$t \to -\infty$ では $\int_0^t \sqrt{\Delta^2 + v^2t^2/4}dt = -\chi$.

したがって、(1),(2) の解を $\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix}$ とおき、$t = \pm 0$ （交差の直前直後）での値をそれぞれ $\begin{pmatrix} c_1^- \\ c_2^- \end{pmatrix}$ および $\begin{pmatrix} c_1^+ \\ c_2^+ \end{pmatrix}$ とすれば、

$$\lim_{t\to-\infty} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1^- e^{i\chi} \\ c_2^- e^{-i\chi} \end{pmatrix}, \tag{17}$$

$$\lim_{t\to\infty} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1^+ e^{i\chi} \\ c_2^+ e^{-i\chi} \end{pmatrix}. \tag{18}$$

(17),(18) を (12),(14),(15) と比較し、A を消去すれば

$$c_1^+ \;=\; e^{-\pi\delta} c_1^- \tag{19}$$

$$c_2^+ \;=\; \sqrt{1 - e^{-2\pi\delta}} \exp(-i\phi) c_1^-. \tag{20}$$

ただし、

$$\phi = \frac{\pi}{4} + \delta(\log\delta - 1) + \arg\Gamma(1 - i\delta)$$

は Stokes の位相。転送行列 M を

$$\begin{pmatrix} c_1^+ \\ c_2^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^- \\ c_2^- \end{pmatrix}$$

とおけば $M_{11} = e^{-\pi\delta}$, $M_{21} = \sqrt{1 - e^{-2\pi\delta}} e^{-i\phi}$ が求まった。時間反転対称性から $M_{22} = M_{11}$ が分かり、行列 M のユニタリー性から $M_{12} = -M_{21}^*$ が言えるので、最終的に

$$M = \begin{pmatrix} e^{-\pi\delta} & -\sqrt{1 - e^{-2\pi\delta}} e^{i\phi} \\ \sqrt{1 - e^{-2\pi\delta}} e^{-i\phi} & e^{-\pi\delta} \end{pmatrix}. \tag{21}$$

状態 $|1\rangle$ が下から上に交差する場合の転送行列は (21) の転置行列で与えられる。

IV. 付録：形式的摂動展開法

(1),(2) を Δ に関する形式的摂動展開の方法で解く (Kayanuma, 1984)。

$$
\begin{aligned}
c_1(t) &= \exp(ivt^2/4)a_1(t), &(22)\\
c_2(t) &= \exp(-ivt^2/4)a_2(t) &(23)
\end{aligned}
$$

とおいて相互作用表示に移ると、(1),(2) より

$$
\begin{aligned}
i\frac{d}{dt}a_1(t) &= \Delta\exp(-ivt^2/2)a_2(t), &(24)\\
i\frac{d}{dt}a_2(t) &= \Delta\exp(ivt^2/2)a_1(t). &(25)
\end{aligned}
$$

$t\to-\infty$ で $a_1(-\infty)=1, a_2(-\infty)=0$ として

$$
a_1(t) = 1-\Delta^2\int_{-\infty}^{t}d\tau\int_{-\infty}^{\tau}d\tau'\exp\bigl[-\frac{i}{2}(\tau^2-{\tau'}^2)\bigr]a_1(\tau'). \tag{26}
$$

これから

$$
a_1(\infty) = 1+\sum_{n=1}^{\infty}(-\Delta^2)^n L_n \tag{27}
$$

$$
L_n = \int_{-\infty}^{\infty}d\tau_{2n}\int_{-\infty}^{\tau_{2n}}d\tau_{2n-1}\cdots\int_{-\infty}^{\tau_2}d\tau_1\exp\bigl[-\frac{iv}{2}\sum_{j=1}^{2n}(-1)^j{\tau_j}^2\bigr]. \tag{28}
$$

ここで $(\tau_1,\tau_2,\cdots,\tau_{2n})$ から $(x_1,x_2,\cdots,x_n;y_1,y_2,\cdots,y_n)$ への積分変数変換を行う。

$$
\begin{aligned}
x_1 &= \tau_1, &(29)\\
x_p &= \tau_1+\sum_{j=1}^{p-1}(\tau_{2j+1}-\tau_{2j}),\quad \text{for}\quad 2\le p\le n, &(30)\\
y_p &= \tau_{2p}-\tau_{2p-1},\quad \text{for}\quad 1\le p\le n. &(31)
\end{aligned}
$$

この変換の意味は分かり難いが、数直線を描いてみれば理解できる [注]。これにより time-ordered integral が二つに分解できて、(28) は

$$
\begin{aligned}
L_n &= \int_{-\infty}^{\infty}dx_n\int_{-\infty}^{x_n}dx_{n-1}\cdots\int_{-\infty}^{x_2}dx_1\int_0^{\infty}dy_n\int_0^{\infty}dy_{n-1}\cdots\int_0^{\infty}dy_1\\
&\times\ \exp\Bigl[-iv\sum_{p=1}^{n}x_py_p-\frac{iv}{2}\Bigl(\sum_{p=1}^{n}y_p\Bigr)^2\Bigr]. &(32)
\end{aligned}
$$

ここで、積分値は積分変数 $(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ の任意の入れ換えに対して不変であることに注意すると、この積分は

$$L_n = \frac{1}{n!}\int_{-\infty}^{\infty} dx_n \int_{-\infty}^{\infty} dx_{n-1} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_0^{\infty} dy_n \int_0^{\infty} dy_{n-1} \cdots \int_0^{\infty} dy_1$$
$$\times \exp\Big[-iv \sum_{p=1}^{n} x_p y_p - \frac{iv}{2}\Big(\sum_{p=1}^{n} y_p\Big)^2\Big] = \frac{1}{n!}\Big(\frac{\pi}{v}\Big)^n \tag{33}$$

と実行できる。ただし、先に x 積分を行い、$y = 0$ に singularity を持たない任意の関数 $f(y)$ と δ 関数について成り立つ関係

$$\int_0^{\infty} dy \delta(vy) f(y) = \frac{1}{2v} f(0) \tag{34}$$

を使った。$2n$ 次の摂動項から $1/n!$ を含む式が出てくることに注意。この値を (27) に代入して足し上げると

$$a_1(\infty) = \exp\Big(-\frac{\pi\Delta}{v}\Big) \tag{35}$$

と求められる。この方法は、多重準位交差の問題や強い位相緩和があるときの Landau-Zener 遷移確率の計算に適用され、厳密な結果を得るのに有用であることが分かっている。

[注]　積分領域が互いに couple1 した (28) の積分において

$$t_1 = \tau_1, \quad t_2 = \tau_2 - \tau_1, \quad t_3 = \tau_3 - \tau_2, \quad \cdots, \quad t_{2n} = \tau_{2n} - \tau_{2n-1}$$

とおけば、積分領域は

$$-\infty < t_1 < \infty, \quad 0 < t_2 < \infty, \quad 0 < t_3 < \infty, \quad \cdots, \quad 0 < t_{2n} < \infty$$

と decouple できる。ここで $t_{2p} = y_p$ $(p = 1, 2, \cdots, n)$ とおき、残りの t_{2p-1} $(p = 1, 2, \cdots, n)$ を「逆変換」すれば (32) の積分を得る。

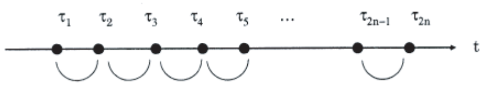

FIG. 3: 積分変数の変換