01

Об адиабатической теореме в квантовой механике

© А.Г. Чирков

С.-Петербургский государственный технический университет

Поступило в Редакцию 22 сентября 2000 г.

На основе метода канонического усреднения в работе, при более общих предположениях, чем в существующих приближениях, построены адиабатическое и постадиабатическое приближения, адиабатическая и нестационарная теории возмущений. Приведена асимптотическая оценка близости точного и приближенного решений.

При переходе от теории квантов Планка и Эйнштейна к квантовой механике большую роль сыграла адиабатическая гипотеза Эренфеста. В 1928 г. М. Борн и В.А. Фок [1] показали, что гипотеза Эренфеста является следствием постулатов квантовой теории. Строгое математическое доказательство адиабатической теории было дано Като [2] в 1949 г. Затем, на основе аналогии между адиабатическим и квазиклассическим приближениями, было построено адиабатическое приближение Ландау–Дыхне [3–5]. Однако адиабатическое приближение Борна–Фока, по существу, не является приближением, так как все члены адиабатического ряда Борна–Фока имеют одинаковый порядок малости [4,6], что, в свою очередь, не позволяет построить постадиабатическое приближение. Выбор волновых функций вещественными (условие Борна–Фока) не позволяет использовать это приближение в задачах с магнитным полем. Результаты адиабатического приближения Ландау–Дыхне переходят в результаты нестационарной теории возмущений только приближенно. Кроме того, оба упомянутых приближения дают неверный предэкспоненциальный множитель [4].

В нестационарном случае существен вопрос о промежутке времени, на котором приближенное решение мало отличается от точного. В упомянутых работах эта проблема не обсуждается вообще.

В данной работе на основе метода канонического усреднения по единым формулам построены адиабатическое и постадиабатическое приближения, адиабатическая теория возмущений и нестационарная теория возмущений. При этом не сохраняются основные допущения теории Борна–Фока.

Основным предметом исследования в нерелятивистской квантовой теории является уравнение Шредингера [5]:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(q,t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(q,t), \tag{1}$$

где $i^2 = -1$, $\hbar = 1.054 \cdot 10^{-27}\,\mathrm{erg \cdot s}$ — постоянная Планка; $q = (q_1, q_2, \ldots, q_n)$ — вообще говоря, точка конфигурационного пространства соответствующей классической системы; t — время; $\Psi(q,t)$ — комплекснозначная функция с интегрируемым квадратом модуля; $\hat{H}$ — самосопряженный (симметрический) оператор, действующий в гильбертовом пространстве.

Уравнение Шредингера (1) должно решаться при соответствующих начальном $\Psi(q,0) = \Psi_0(q)$ и некоторых граничных условиях.

Ситуация, изучаемая в нестационарной теории возмущений, возникает при возможности представления оператора $\hat{H}$ в виде суммы: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon\hat{V}(q,t)$ $(0 < \varepsilon \ll 1)$ двух самосопряженных операторов.

В адиабатическом приближении оператор возмущения $\hat{V}(q,t)$ не мал, а зависит от медленного времени $\tau = \varepsilon t$ так, что $\hat{V}(q,t) = \hat{V}(q,\tau)$, причем решение необходимо построить на асимптотически больших временах $t \sim 1/\varepsilon$, когда изменение оператора возмущения будет велико.

В этом случае разбиение полного оператора Шредингера $\hat{H}$ на сумму двух операторов — порождающего (невозмущенного) и возмущения не имеет смысла. Поэтому, чтобы охватить обе возможности, далее будем рассматривать задачу (1) с оператором Шредингера, зависящим от времени $\hat{H} = \hat{H}(q,t)$.

Будем предполагать, что соответствующая (1) стационарная задача при параметрической зависимости оператора Шредингера от времени разрешима и имеет дискретный спектр, т. е. известны собственные функции и собственные значения задачи:

$$\hat{H}(t)\psi_n(q,t) = E_n(t)\psi_n(q,t), \tag{2}$$

в которой время t фиксировано. Собственные функции предполагаются ортонормированными обычным образом:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi_m(q,t)\psi_n(q,t)dq = \delta_{mn} \tag{3}$$

и чертой обозначено комплексное сопряжение.

Будем разыскивать решение точной задачи (1) в виде:

$$\Psi(q,t) = \sum_n c_n(t)\psi_n(q,t)\exp\left\{-i\int\limits_0^t \Omega_n(z)dz\right\}, \tag{4}$$

где $\Omega_n(t) = \omega_n(t) + v_{nn}(t)$, $\omega_n(t) = E_n(t)/\hbar$, $v_{nn} = -i\int\limits_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi}_n \frac{\partial\psi_n}{\partial t} dq$. Смысл такого выбора фазы будет ясен из дальнейшего.

Подставляя (4) в (1), получаем уравнения для коэффициентов разложения $c_m(t)$:

$$\dot{c}_m(t) = -i\sum_{m,n}{}' v_{mn}c_n \exp\left\{i\int\limits_0^t \Omega_{mn}(z)dz\right\}, \tag{5}$$

где точкой обозначена полная производная по времени, штрих у знака суммы означает отсутствие диагонального слагаемого с $m = n$. Матрица коэффициентов v_{mn} имеет вид

$$v_{mn} = -i\int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi_m(q,t)\frac{\partial\psi_n(q,t)}{\partial t}dq \tag{6}$$

и является эрмитовой, т. е. $v_{mn} = \overline{v}_{nm}$.

Именно указанный в (4) выбор фазы обеспечивает отсутствие в сумме диагонального слагаемого, ответственного за главный резонанс. При его наличии в сумме (5) появлялся бы малый резонансный знаменатель.

Действительно, дифференцируя по времени уравнение (2) и используя самосопряженность оператора Шредингера, получаем:

$$v_{mn} = (i/\hbar\omega_{mn})\left(\partial\hat{H}/\partial t\right)_{mn}, \qquad m \neq n. \tag{7}$$

Очевидно, что в случае действительных собственных функций $\overline{\psi}_n = \psi_n$ диагональные элементы $v_{nn} = 0$. Этот факт и являлся причиной выбора действительной нормировки в приближении Борна–Фока.

Аналогичные действия у случае $m = n$ приводят к теореме Гельмана–Фейнмана $\left(\partial\hat{H}/\partial t\right)_{nn} = \partial E_n/\partial t$ и не определяют диагональных матричных элементов. В том случае, когда оператор Шредингера зависит от времени τ через набор функций $\xi_i(\tau)$ $(i = 1, 2, \ldots, N)$, элементы v_{nn} определяют топологическую адиабатическую фазу Берри [8], значение которой не зависит от времени эволюции, а определяется только замкнутым контуром в пространстве параметров.

Из соотношений (7) легко определяются три случая, позволяющие развить теорию возмущений. В адиабатическом случае $\hat{H} = \hat{H}(\xi(\tau))$, так что $\partial\hat{H}/\partial t = \varepsilon\left(\partial\hat{H}/\partial\xi\right)(\partial\xi/\partial\tau)$. Далее следует случай нестационарной теории возмущений, когда оператор Шредингера имеет вид $\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon\hat{V}(q, t)$, и, наконец случай адиабатической теории возмущений, когда $\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon\hat{V}(q, \tau)$.

Система уравнений (5), дополненная комплексносопряженной, является гамильтоновой (в классическом смысле) с функцией Гамильтона:

$$H(c, c^*, t) = -i{\sum_{m,n}}' v_{mn}(t) c_n c_m^* \exp\left\{ i \int_0^t \Omega_{mn}(z) dz \right\}, \tag{8}$$

описывающей классическую распределенную систему. Гамильтоновость обеспечивается эрмитовостью матрицы коэффициентов v_{mn} и позволяет применить развитую в [7] фазовую теорию возмущений (метод канонического усреднения).

В адиабатическом случае будем считать, что оператор Шредингера имеет вид $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(q, \xi(\tau))$ $(\tau = \varepsilon t$ — медленное время). Тогда матричные элементы $v_{mn} \sim \varepsilon\xi'$ и функцию Гамильтона (8) можно представить в виде

$$\varepsilon\hat{H}_1(c, c^*, t, \tau) = -i\varepsilon{\sum_{m,n}}' v_{mn}(\tau) c_n c_m^* \exp\left\{ i \int_0^t \Omega_{mn}(\tau) dt \right\}, \tag{9}$$

где $\dot{\tau} = \varepsilon$, $\Omega_{mn} = \Omega_m - \Omega_n$.

Каноническая форма позволяет провести переход к эволюционным уравнениям с помощью результатов, полученных в [7]:

$$\overline{H}^{(2)}(\bar{c}, \bar{c}^*, \tau) = \varepsilon \overline{H}_1(\bar{c}, \bar{c}^*, \tau) + \varepsilon^2 \overline{H}_2(\bar{c}, \bar{c}^*, \tau),$$

$$\overline{H}_1 = \langle H_1 \rangle, \tag{10}$$

$$\overline{H}_2 = -\langle (\partial \tilde{H}_1 / \partial c^*)(\partial \{H_1\} / \partial c) \rangle,$$

где $\overline{H}^{(2)}$ — второе приближение для усредненного гамильтониана, $\bar{c} = (\bar{c}_1, \bar{c}_2, \dots)$, $\bar{c}^* = (\bar{c}_1^*, \bar{c}_2^*, \dots)$ — эволюционные составляющие переменных c, c^* и использованы обозначения:

$$\langle f \rangle = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int\limits_{t_0}^{t_0+T} f(\bar{c}, \bar{c}^*, t) dt,$$

$$\tilde{f}(\bar{c}, \bar{c}^*, t) = f(\bar{c}, \bar{c}^*, t) - \langle f \rangle, \tag{11}$$

$$\{f\} = \int \tilde{f}(\bar{c}, \bar{c}^*, t) dt.$$

С помощью соотношений (10) первое приближение $c_k^{(1)}$ для искомых переменных c_k строится по формулам $c_k^{(1)} = \bar{c}_k$, где $\bar{c}_k$ определяется из уравнений $\dot{c}_k = \varepsilon(\partial \overline{H}_1 / \partial \bar{c}_k^*)$.

Второе приближение $c_k^{(2)}$ для переменных c_k строится по формулам:

$$c_k^{(2)} = \bar{c}_k + \partial \{H_1\} / \partial \bar{c}_k^*, \tag{12}$$

где $\bar{c}_k$ находятся из уравнений:

$$\dot{\bar{c}}_k = \partial \overline{H}^{(2)} / \partial \bar{c}_k^*. \tag{13}$$

Усредняя выражение (9) вдоль порождающего решения ($c_k = \text{const}$, $\tau = \text{const}$), находим $\overline{H}_1 = \langle H_1 \rangle = 0$, откуда следует $\dot{\bar{c}}_k = 0$. Последний результат есть адиабатическая теорема Като [2] (доказательство см., например, в [9]), полученная практически без вычислений. В классическом смысле эволюционные составляющие $\bar{c}_k$ исходных переменных c_k являются адиабатическими инвариантами [10], т. е. сохраняют начальные значения на асимптотических временах $t \sim 1/\varepsilon$.

При получении этого результата необходимо предполагать, что $\Omega_{mn}(\tau) \neq O(\varepsilon)$, т.е. в системе отсутствует вырождение, нет близких уровней и во время эволюции уровни не пересекаются.

В адиабатическом (первом) приближении решение уравнения Шредингера имеет вид:

$$\Psi^{(1)}(q,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{(1)} \psi_n(q,t) \exp\left\{-i \int_0^t \Omega_n(z)dz\right\}. \tag{14}$$

Оценка разности $|\Psi(q,t) - \Psi^{(1)}(q)| < C\varepsilon$ на временах $t \sim 1/\varepsilon$ (C — константа, не зависящая от ε) при достаточно общих предположениях следует из теоремы Ф.С. Лося [11].

Для построения второго (постадиабатического) приближения воспользуемся соотношениями (10)–(13). Простые вычисления дают:

$$\overline{H}_2 = -i \sum_k \Delta\Omega_k(\tau) \bar{c}_k \bar{c}_k^*, \tag{15}$$

$$\Delta\Omega_k = \sum_l{}' \frac{|v_{kl}|^2}{\Omega_{kl}},$$

так что второе приближение для усредненной функции Гамильтона $\overline{H}^{(2)}$ имеет вид:

$$\overline{H}^{(2)} = -i\varepsilon^2 \sum_k \Delta\Omega_k(\tau) \bar{c}_k \bar{c}_k^*. \tag{16}$$

Уравнение Гамильтона (13) с функцией Гамильтона (16) для эволюционных составляющих $\bar{c}_k$ легко интегрируются и дают:

$$\bar{c}_k = A_k \exp\left\{-i\varepsilon^2 \int_0^\tau \Delta\Omega_k(z)dz\right\} = A_k \exp(-i\alpha_k). \tag{17}$$

Постоянные A_k определяются по начальным условиям.

Заметим, что, очевидно, можно было включить фазу коэффициентов $\bar{c}_k$ в исходное разложение (4). В этом случае получили бы $\overline{H}_2 = 0$, $\overline{H}^{(2)} = 0$.

Второе приближение для коэффициентов разложения в (4) строится по формулам (12), (13):

$$c_k^{(2)} = A_k^{(2)} \exp(-i\alpha_k) - \varepsilon \sum_m{}' \frac{v_{km}}{\Omega_{km}} A_m \exp(-i\alpha_m + i\Omega_{km} t). \qquad (18)$$

С помощью коэффициентов $c_k^{(2)}$ находим второе приближение $\Psi^{(2)}(q,t)$ для решения уравнения Шредингера:

$$\Psi^{(2)}(q,t) = \sum_k \Big[A_k \exp(-i\alpha_k) - \varepsilon \sum_m{}' \frac{v_{km}}{\Omega_{km}} A_m \exp(-i\alpha_m - i\Omega_{km} t) \Big]$$

$$\times \Psi_k \exp\Big[-i \int_0^t \Omega_k(z) dz \Big]. \qquad (19)$$

Следует отметить, что в формулах (18), (19) под знаком суммы можно ограничится первым приближением $A_m^{(1)}$ по ε для постоянных интегрирования.

В случае задачи Коши система в начальный момент времени находится в некотором стационарном состоянии дискретного спектра невозмущенной задачи с оператором Шредингера $\hat{H}_0$, например в s-м, т. е. $\Psi(q,t)|_{t=0} = \Psi_s^0$. При этом, в отличие от стационарного случая, нельзя считать, что $c_n|_{t=0} = \delta_{ns}$, так как разложение ведется по собственным функциям возмущенной задачи $\psi_n(q,t) = \psi_n(q, \xi(t))$, где $\xi(t)$ — параметры, определяющие временнýю зависимость возмущения. Поэтому дополнительно будем предполагать режим включения возмущения таким, что $\xi(0) = \dot{\xi}(0) = 0$. Задачу можно решить и в других условиях, что будет означать сочетание режима мгновенного включения возмущения с последующим его адиабатическим изменением.

Таким образом, будем считать, что уравнение для определения коэффициентов A_k имеет следующий вид:

$$c_k|_{t=0} = \delta_{ks} = A_k - \varepsilon \sum_m{}' \left[\frac{v_{km}(\tau)}{\Omega_{km}(\tau)} \right]_{t=0} A_m. \qquad (20)$$

Очевидно, что матричные элементы $v_{km} \sim \dot{\xi}(\tau)$ и при принятых условиях получаем $A_{ks} = \delta_{ks}$, т. е.

$$c_{ks}^{(2)} = \delta_{ks} \exp(-i\alpha_k) - \varepsilon \frac{v_{ks}}{\Omega_{ks}} \exp(-i\alpha_s + i\Omega_{ks} t). \qquad (21)$$

Окончательно второе (постадиабатическое) приближение $\Psi^{(2)}$ для волновой функции имеет вид:

$$\Psi^{(2)}(q,t) = \psi_s \exp\left[-i\int_0^t \Omega_s(z)dz\right] - {\sum_k}' \frac{V_{ks}}{\Omega_{ks}}\psi_k \exp\left[i\Omega_{ks}t - i\alpha_s - i\int_0^t \Omega_k(z)dz\right]. \qquad (22)$$

Можно доказать [1], что справедлива оценка $|\Psi(q,t) - \Psi^{(2)}(q,t)| < B\varepsilon^2$ на временах $t \sim 1/\varepsilon$. В физических работах конечность интервала времени, на котором приближенное решение аппроксимирует точное, не учитывается.

В случае адиабатической теории возмущений соответствующие результаты получаются из формул адиабатического приближения при учете дополнительной малости амплитуды возмущения.

Список литературы

[1] *Born M., Fock V.* // Zs. Phys. 1928. S. 165–180.
[2] *Kato T.* // J. Phys. Soc. Japan. 1950. V. 5. S. 435–439.
[3] *Дыхне А.М.* // Журн. эксп. и теор. физ. 1960. Т. 38. В. 2. С. 570–578.
[4] *Дыхне А.М.* // Журн. эксп. и теор. физ. 1961. Т. 41. В. 4. С. 1324–1327.
[5] *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* Квантовая механика. 2-е изд., перераб. и доп. М.: ГИФМЛ, 1963. 702 с.
[6] *Делоне Н.Б., Крайнов В.П.* Атом в сильном световом поле. 2-е изд., перераб. М.: Энергоатомиздат, 1984. 224 с.
[7] *Чирков А.Г.* // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. В. 8. С. 8.
[8] *Виницкий С.И.* и др. // Усп. физ. наук. 1990. Т. 160. В. 6. С. 1–49.
[9] *Мессиа А.* Квантовая механика: В 2 т. Т. 2. М.: Наука, 1979. 583 с.
[10] *Арнольд В.И.* Дополнительные главы теории обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1978. 304 с.
[11] *Лось Ф.С.* // Укр. мат. ж. 1950. Т. 2. В. 3. С. 87–93.