

Univerzita Karlova v Praze  
Matematicko-fyzikální fakulta

## BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Petr Morávek

### **Kvantové systémy s vnějšími parametry**

Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedoucí bakalářské práce: Doc. RNDr. Pavel Cejnar, Dr.

Studijní program: Fyzika, Obecná fyzika

2008

Rád bych poděkoval vedoucímu práce Doc. RNDr. Pavlu Cejnarovi, Dr. za odborné vedení a cenné připomínky během vypracovávání mé práce.

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce a jejím zveřejňováním.

V Praze dne 28. května 2008

Petr Morávek

# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Pechukas-Yukawův model</b>	<b>6</b>
2.1	Výchozí předpoklady . . . . .	6
2.2	Dynamické rovnice „pohybu“ hladin . . . . .	7
2.3	Souvislost se stacionární poruchovou teorií . . . . .	8
2.4	Integrály pohybu . . . . .	9
2.5	Analogie nabitých odpuzujících se částic . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Skutečná a odvrácená křížení hladin</b>	<b>11</b>
3.1	No crossing teorém . . . . .	11
3.2	Vlastní stavy v oblasti odvrácených křížení . . . . .	12
3.3	Kde hledat odvrácená křížení? . . . . .	12
<b>4</b>	<b>Dvouhadinové systémy</b>	<b>14</b>
4.1	No crossing teorém v dimenzi 2 . . . . .	14
4.2	Systémy závisující na více parametrech . . . . .	14
4.3	Komplexní hodnota vnějšího parametru . . . . .	16
<b>5</b>	<b>Modelový spinový systém</b>	<b>19</b>
5.1	Popis systému . . . . .	19
5.2	Porucha typu $\hat{V}^{(ij)}$ . . . . .	20
5.3	Porucha typu $\hat{V}^{(ij)}$ společně s $\hat{W}^{(ij)}$ . . . . .	23
<b>6</b>	<b>Závěr</b>	<b>26</b>
	<b>Literatura</b>	<b>28</b>
<b>A</b>	<b>Mathematica notebook</b>	<b>29</b>

Název práce: Kvantové systémy s vnějšími parametry  
Autor: Petr Morávek  
Katedra (ústav): Ústav částicové a jaderné fyziky  
Vedoucí bakalářské práce: Doc. RNDr. Pavel Cejnar, Dr.  
E-mail vedoucího: cejnar@ipnp.troja.mff.cuni.cz

Abstrakt: V předložené práci studujeme kvantové systémy popsané hamiltoniánem závislejícím lineárně na vnějších parametrech. Zvýšená pozornost je věnována systémům o libovolné dimenzi závislým na jednom reálném parametru. Pro tyto systémy jsou odvozeny dynamické rovnice pohybu energetických hladin a je ukázána jejich podobnost s rovnicemi pohybu nabitých odpuzujících se částic. Zkoumáme také, za jakých podmínek se může objevit skutečné a odvrácené křížení energetických hladin. Podrobněji diskutujeme křížení hladin v dvouhladinových systémech včetně dvou zobecnění vnějšího parametru – parametr z oboru komplexních čísel a hamiltonián závislející na dvou reálných parametrech. V poslední části práce jsou některé důležité jevy demonstrovány na vhodně zvoleném spinovém systému.

Klíčová slova: Pechukas-Yukawův model, odvrácená křížení, dvouhladinové systémy, stacionární poruchová teorie

Title: Quantum systems with external parameters  
Author: Petr Morávek  
Department: Institute of Particle and Nuclear Physics  
Supervisor: Doc. RNDr. Pavel Cejnar, Dr.  
Supervisor's e-mail address: cejnar@ipnp.troja.mff.cuni.cz

Abstract: In the present work we study quantum systems determined by Hamiltonian depending linearly on external parameters. Special attention is paid to systems of arbitrary dimension depending on single real parameter. For these systems we derive dynamical equations for energy levels motion and show their similarity to equations of motion of charged particles with mutual repulsive force. We investigate conditions for real and avoided level crossings to occur. Particularly we discuss level crossings in two-level systems including two generalizations of external parameter – complex values of external parameter and Hamiltonian dependent on two real parameters. In the last part of this work we demonstrate some of significant features on conveniently chosen spin system.

Keywords: Pechukas-Yukawa model, avoided crossings, two-level systems, stationary perturbation theory

## Úvod

V této práci se věnujeme *kvantovým systémům s vnějšími parametry*. Pod tímto pojmem rozumíme libovolný systém popsáný hamiltoniánem závislým na jednom, či více parametrech. V praxi může jako parametr vystupovat intenzita vnějšího pole nebo jakákoliv jiná charakteristika, kterou lze měnit nezávisle na vnitřní dynamice systému.

Až na několik málo výjimek<sup>1</sup> se v této práci budeme zabývat systémy popsány hamiltoniánem závislým lineárně na jednom reálném parametru. Jinými slovy – omezíme se na třídu hamiltoniánů, které lze zapsat ve tvaru

$$\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}, \quad (1.1)$$

kde  $\hat{H}_0$  značí hamiltonián neporušeného systému a parametr  $\lambda \in (-\infty, +\infty)$  vyjadřuje sílu poruchy  $\hat{V}$ .

V kvantových systémech s vnějšími parametry je možné pozorovat mnoho zajímavých úkazů – odvrácená křížení (z anglického *avoided crossing*), geometrická (Berryho) fáze vlnových funkcí v okolí tzv. diabolických bodů, disipační efekty při řízené změně parametru s časem, kvantové fázové přechody (skokové změny vlastností systému), vynoření se klasických vlastností při stochastické změně parametru, ...

My se zaměříme na vývoj energií vlastních stavů hamiltoniánu pod změnami vnějšího parametru. Odvodíme dynamické rovnice pro vývoj tohoto systému a ukážeme, že mají podobnou formu jako rovnice pro vývoj systému nabitých odpuzujících se částic. Dynamický přístup k vývoji systému v závislosti na vnějším parametru poprvé navrhl Pechukas [1] a dále rozvinul Yukawa [2], proto je často označován jako *Pechukas-Yukawův model*. V této souvislosti také ukážeme, že energetické hladiny se v obecném systému bez skrytých symetrií nikdy nekříží (tzv. *no crossing theorem*). Zvýšenou pozornost budeme věnovat oblastem, kde se energetické hladiny nejvíce přibližují (oblast odvrácených křížení hladin), a podrobněji si rozebereme skutečná i odvrácená křížení pro dvouhladinový systém. V poslední části práce budeme demonstrovat výše zmíněné jevy na modelovém spinovém systému.

<sup>1</sup>Těmi jsou dvě zobecnění vnějšího parametru v kapitole o dvouhladinových systémech.

## Pechukas-Yukawův model

### 2.1 Výchozí předpoklady

Jak bylo již výše zmíněno budeme uvažovat hamiltonián ve tvaru (1.1) lineárně závislý na bezrozměrném reálném parametru  $\lambda \in (-\infty, +\infty)$ .

Zavedeme označení  $E_n$  pro vlastní hodnoty hamiltoniánu příslušející vlastnímu stavu  $|n\rangle$

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad (2.1)$$

kde pro jednoduchost a přehlednost explicitně nezapisujeme závislosti na parametru  $\lambda$ . Této notaci se budeme držet i nadále, je však potřeba mít na paměti, že na parametru  $\lambda$  závisí hamiltonián  $\hat{H}$ , jeho vlastní hodnoty  $E_n$ , i vlastní stavy  $|n\rangle$ . Pokud bude potřeba vyjádřit některou ze závislých veličin v jiném bodě než obecném  $\lambda$ , použijeme delší zápis, ve kterém budou všechny závislosti viditelně označeny.

Zavedeme označení maticových komponent libovolného operátoru  $\hat{A}$

$$A_{mn} = \langle m | \hat{A} | n \rangle. \quad (2.2)$$

Požadujeme fixní ortonormalitu všech vlastních stavů

$$\langle m | n \rangle = \delta_{mn}. \quad (2.3)$$

Rozumným požadavkem na poruchu  $\hat{V}$  je

$$[\hat{H}_0, \hat{V}] \neq 0, \quad (2.4)$$

jelikož právě tehdy jsou hamiltoniány pro dvě různé hodnoty  $\lambda$  nekompatibilní, a díky tomu zkoumaný hamiltonián určuje netriviální<sup>1</sup> vývoj vlastních hodnot a vlastních stavů systému. Níže odvozované vztahy, jsou ale obecně platné i při nesplnění této podmínky.

<sup>1</sup>V případě, že by hamiltoniány pro různé hodnoty  $\lambda$  komutovaly, znamenalo by to, že mají společný systém vlastních stavů, a v konečném důsledku to, že vlastní hodnoty  $E_n$  by byly nejvýše lineární funkcí  $\lambda$ , což není příliš zajímavý systém.

## 2.2 Dynamické rovnice „pohybu“ hladin

Při odvozování dynamických rovnic pro „pohyb“ energetických hladin budeme postupovat podobně jako Stöckmann [3]. Vydeme ze stacionární Schrödingerovy rovnice (2.1), kterou zderivujeme podle  $\lambda$

$$\hat{V} |n\rangle + \hat{H} \left( \frac{\partial}{\partial \lambda} |n\rangle \right) = \frac{dE_n}{d\lambda} |n\rangle + E_n \left( \frac{\partial}{\partial \lambda} |n\rangle \right). \quad (2.5)$$

Poté rovnici vynásobíme zleva  $\langle m|$  a zapíšeme pomocí maticových komponent

$$\langle m| \left( \frac{\partial}{\partial \lambda} |n\rangle \right) (E_n - E_m) = V_{mn} - \frac{dE_n}{d\lambda} \delta_{mn}. \quad (2.6)$$

Z této rovnice pro  $m = n$  dostáváme první z hledaných rovnic:

$$\frac{dE_n}{d\lambda} = V_{nn} \quad (2.7)$$

Nyní obrátíme svou pozornost na diferenciální rovnici pro maticové komponenty poruchy  $\hat{V}$ .

$$\frac{dV_{mn}}{d\lambda} = \left( \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle m| \right) \hat{V} |n\rangle + \langle m| \hat{V} \left( \frac{\partial}{\partial \lambda} |n\rangle \right) \quad (2.8)$$

Vztah upravíme za použití relace úplnosti  $\sum_k |k\rangle \langle k| = \hat{1}$ , kterou vložíme do obou členů na pravé straně rovnice.

$$\frac{dV_{mn}}{d\lambda} = \sum_k \left( \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle m| \right) |k\rangle V_{kn} + \sum_k V_{mk} \langle k| \left( \frac{\partial}{\partial \lambda} |n\rangle \right) \quad (2.9)$$

Z rovnice (2.6) můžeme dosadit za všechny skalární součiny obsahující derivaci podle  $\lambda$  kromě dvou členů obsahujících součin vlastního stavu se svojí derivací (ty vytkneme před sumy).

$$\begin{aligned} \frac{dV_{mn}}{d\lambda} &= V_{mn} \left[ \left( \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle m| \right) |m\rangle + \langle n| \left( \frac{\partial}{\partial \lambda} |n\rangle \right) \right] + \\ &+ \sum_{k \neq m} \frac{V_{mk} V_{kn}}{E_m - E_k} + \sum_{k \neq n} \frac{V_{mk} V_{kn}}{E_n - E_k} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Členy vytknuté před sumou je možné odstranit substitucí

$$V_{mn} = W_{mn} \exp \left[ \int \left( \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle m| \right) |m\rangle + \langle n| \left( \frac{\partial}{\partial \lambda} |n\rangle \right) d\lambda \right], \quad (2.11)$$

kde pro  $W_{mn}$  platí stejná sada diferenciálních rovnic (2.7) a (2.10) jako pro  $V_{mn}$ . Z tohoto důvodu můžeme bez újmy na obecnosti předpokládat, že pro všechny vlastní stavy v každém bodě platí

$$\langle n| \left( \frac{\partial}{\partial \lambda} |n\rangle \right) = 0. \quad (2.12)$$

Nyní přeznačíme některé proměnné a provedeme substituci, jejíž význam vyjde najevo později.

$$x_n = E_n \quad (2.13a)$$

$$p_n = V_{nn} \quad (2.13b)$$

$$f_{mn} = (E_m - E_n)V_{mn}, \quad n \neq m \quad (2.13c)$$

Z předchozích vztahů a provedené substituce dostáváme kompletní sadu dynamických rovnic ve tvaru:

$$\frac{dx_n}{d\lambda} = p_n \quad (2.14a)$$

$$\frac{dp_n}{d\lambda} = 2 \sum_{k \neq n} \frac{|f_{nk}|^2}{(x_n - x_k)^3} \quad (2.14b)$$

$$\frac{df_{mn}}{d\lambda} = \sum_{k \neq m, n} f_{mk} f_{kn} \left( \frac{1}{(x_m - x_k)^2} - \frac{1}{(x_n - x_k)^2} \right) \quad (2.14c)$$

Soustava rovnic (2.14) nese úplnou informaci o dynamice systému v závislosti na  $\lambda$ . V praxi se tato soustava rovnic nepoužívá pro zkoumání vývoje systému, jelikož je výpočetně mnohem jednodušší provést numerickou diagonalizaci hamiltoniánu pro konkrétní hodnoty parametru  $\lambda$ . Odvozené rovnice jsou důležité z interpretačního hlediska – umožňují dobrý intuitivní náhled na chování energetických hladin (analogie nabitých odpuzujících se částic) a také otevírají cestu k aplikaci metod klasické statistické mechaniky na vývoj ryze kvantového systému.

## 2.3 Souvislost se stacionární poruchovou teorií

Uvážíme-li možnost zapsat hamiltonián v delta okolí každého bodu  $\lambda$  ve tvaru

$$\hat{H}(\lambda + \delta\lambda) = \hat{H}(\lambda) + \delta\lambda \hat{V}, \quad (2.15)$$

můžeme použít pro zkoumání lokálního chování systému v závislosti na parametru  $\lambda$  vztahy stacionární poruchové teorie.

$$E_n(\lambda + \delta\lambda) = E_n(\lambda) + \delta\lambda V_{nn}(\lambda) + (\delta\lambda)^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}(\lambda)|^2}{E_n(\lambda) - E_k(\lambda)} + \dots \quad (2.16)$$

$$|n\rangle_{\lambda+\delta\lambda} = |n\rangle_{\lambda} + \delta\lambda \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}(\lambda)}{E_n(\lambda) - E_k(\lambda)} |k\rangle_{\lambda} + \dots \quad (2.17)$$

Vidíme, že jsme mohli celou soustavu dynamických rovnic systému obdržet přímo ze stacionární poruchové teorie. Pro názornost bylo ale v předchozím oddíle provedeno jejich odvození bez jakékoliv zmínky poruchové teorie. Z rozvoje vlastních stavů vidíme, že oprava prvního řádu je vždy ortogonální k původnímu stavu, a tudíž je skutečně opodstatněný předpoklad (2.12).

## 2.4 Integrály pohybu

Již Yukawa [2] ukázal, že soustava rovnic (2.14) má nekonečně mnoho integrálů pohybu. Ne všechny jsou však nezávislé. Jelikož stopa matice nezávisí na volbě báze, je integrálem pohybu stopa každého operátoru, který explicitně nezávisí na parametru  $\lambda$ . Důležitou roli v dalších výpočtech bude hrát komutátor

$$\hat{F} = [\hat{H}_0, \hat{V}] = [\hat{H}, \hat{V}], \quad (2.18)$$

který má komponenty  $f_{mn} = (E_m - E_n)V_{mn}$ , což je stejná sada veličin jako v odvozených dynamických rovnicích. Druhým operátorem, který budeme v dalších výpočtech používat, je porucha  $\hat{V}$ , která s  $\hat{F}$  nekomutuje. Z výše uvedeného je tedy zřejmé, že každý výraz typu

$$\text{Tr} \left( \hat{F}^{\alpha_1} \hat{V}^{\beta_1} \hat{F}^{\alpha_2} \hat{V}^{\beta_2} \dots \right) \quad (2.19)$$

je integrálem pohybu našeho systému.

Yukawa [4] odvodil počet nezávislých integrálů pohybu a ukázal kompletní integrabilitu systému. Pokud se vrátíme k výchozí rovnici (1.1) tvaru hamiltoniánu a přejdeme k volitelné bázi nezávislé na  $\lambda$ , dostáváme pro komponenty hamiltoniánu sadu vztahů

$$H_{\mu\nu}(\lambda) = H_{0\mu\nu} + \lambda V_{\mu\nu}, \quad (2.20)$$

které jsou řešením jednoduché soustavy diferenciálních rovnic  $\frac{dH_{\mu\nu}}{d\lambda} = V_{\mu\nu}$ . Řešení této sady rovnic musí být nutně ekvivalentní řešení soustavy (2.14).

Počet nezávislých integrálů pohybu soustavy (2.20) je evidentně rovný potu nezávislých komponent  $H_{\mu\nu}$ . Tento počet závisí na stupni symetrie hamiltoniánu, ale důležité je to, že je rovný počtu veličin  $p_n$  a  $f_{mn}$  dohromady. Fázový prostor systému určeného dynamickými rovnicemi (2.14) je tvořen veličinami  $p_n$ ,  $f_{mn}$  a  $x_n$  – má tedy dimenzi o  $N = \dim \hat{H}$  vyšší, než je celkový počet nezávislých integrálů pohybu. Z toho vyplývá, že integrály pohybu určují ve fázovém prostoru podprostor dimenze  $N$  (což je také počet energetických hladin), přesně jako v případě klasicky integrabilního systému s  $N$  stupni volnosti.

Nyní se podíváme na některé důležité integrály pohybu ve tvaru (2.19). Těmi jsou především ty, které obsahují součin  $\hat{V}$  a  $\hat{F}$  do druhé mocniny. Jelikož stopy  $\hat{F}$  a  $\hat{V}\hat{F}$  jsou nulové, zbývají nám z tohoto typu již jen tři.

$$P = \text{Tr} \hat{V} = \sum_n V_{nn} = \sum_n p_n \quad (2.21)$$

$$W = \frac{1}{2} \text{Tr} \hat{V}^2 = \frac{1}{2} \sum_n V_{nn}^2 + \frac{1}{2} \sum_{m \neq n} V_{mn} V_{nm} = \frac{1}{2} \sum_n p_n^2 + \frac{1}{2} \sum_{m \neq n} \frac{|f_{nm}|^2}{(x_n - x_m)^2} \quad (2.22)$$

$$Q = \frac{1}{2} \text{Tr} \hat{F}^2 = \frac{1}{2} \sum_{m \neq n} |f_{mn}|^2 \quad (2.23)$$

## 2.5 Analogie nabitých odpuzujících se částic

Na soustavu dynamických rovnic (2.14) je možné pohlížet jako na rovnice popisující systém nabitých odpuzujících se částic s jedním stupněm volnosti. Jak napovídá již přeznačení (2.13), roli pozice částic hrají energie vlastních stavů  $x_n = E_n$ , hybnost částic má analogii v diagonálních komponentách poruchy  $p_n = V_{nn}$ , mimodiagonální komponenty  $f_{mn} = (x_m - x_n)V_{mn}$  jsou jakousi obdobou nábojů částic a parametr  $\lambda$  zastupuje čas.

Hlavní odlišnosti obou systémů se skrývají právě v chování  $f_{mn}$ . Jednak „náboje“ energetických hladin závisí na parametru  $\lambda$ , na rozdíl od nábojů skutečných nabitých částic, které jsou v čase konstantní. Druhý rozdíl spočívá v tom, že pro vyšší dimenze hamiltoniánu (konkrétně dimenze vyšší než 3) nelze v obecném případě provést faktorizaci členu  $|f_{nk}|^2$  a přiřadit každé hladině konkrétní „náboj“.

Naši analogii můžeme aplikovat i na některé ze základních integrálů pohybu. Vztah (2.21) má tvar zákona zachování celkové hybnosti.  $W$  udává celkovou energii systému, a dokonce je možné ji rozdělit na kinetickou a potenciální část.

$$W_{kin} = \frac{1}{2} \sum_n p_n^2 \quad (2.24)$$

$$W_{pot} = \frac{1}{2} \sum_{m \neq n} \frac{|f_{nm}|^2}{(x_n - x_m)^2} \quad (2.25)$$

Poslední integrál pohybu  $Q$  je v literatuře často označován jako moment hybnosti. Vzhledem k tomu, že energetické hladiny mají pouze jeden stupeň volnosti, je toto pojmenování poněkud neintuitivní. V analogii nabitých odpuzujících se částic by bylo vhodnější tento integrál pohybu přirovnat k zákonu zachování celkového náboje.

## Skutečná a odvrácená křížení hladin

### 3.1 No crossing teorém

Z analogie odpuzujících se částic je možné nahlédnout, že pokud z nějakého důvodu v průběhu přibližování hladin nevymizí element  $f_{mn}$ , budou se hladiny s klesající vzdáleností více a více odpuzovat. Ve výsledku, podobně jako v případě odpuzujících se částic, nedojde nikdy k přesnému překřížení jejich drah. Poměrně často ale dochází k velmi těsnému přiblížení drah energetických hladin, tzv. *odvrácená křížení*.

Předpokládejme na chvíli, že křížení hladin je možné. Hodnoty energií vlastních stavů hamiltoniánu jsou kořeny charakteristického polynomu

$$p(\lambda, E) = \det[\hat{H}(\lambda) - E\hat{\mathbb{1}}]. \quad (3.1)$$

Křížení hladin  $i$  a  $j$  v bodě  $\lambda_0$  znamená, že musí platit  $E_i(\lambda_0) = E_j(\lambda_0) = E_0$ , což je ekvivalentní podmínce

$$\frac{\partial p}{\partial E}(\lambda_0, E_0) = 0, \quad (3.2)$$

tedy ve směru  $E$  se hodnota polynomu v okolí  $E_0$  pouze dotýká hodnoty 0, ale nekříží ji. Jelikož je  $\hat{H}$  hermitovský operátor, máme zajištěno, že charakteristický polynom má právě  $N = \dim \hat{H}$  reálných kořenů. Z tohoto faktu plyne další omezující podmínka na chování charakteristického polynomu v okolí bodu  $[\lambda_0, E_0]$  – pro  $\lambda < \lambda_0$ , i pro  $\lambda > \lambda_0$  musí hodnota polynomu v okolí  $E_0$  dvakrát překřížit 0. Tedy i ve směru parametru  $\lambda$  se hodnota polynomu pouze dotýká nulové hodnoty a dostáváme podobnou podmínku jako výše.

$$\frac{\partial p}{\partial \lambda}(\lambda_0, E_0) = 0 \quad (3.3)$$

Pro křížení drah energetických hladin je tedy třeba splnit dvě nezávislé podmínky (3.2) a (3.3), což v obecném případě není možné provést změnou jediného reálného parametru. Křížení hladin tedy nastává jen ve výjimečných případech, jejichž množina má míru nula.

Skutečné křížení hladin je však možné (a naprosto běžné), pokud hladiny navzájem vůbec neinteragují ( $f_{ij} \equiv 0$ ). Takové chování lze očekávat, pokud je možné zapsat hamiltonián  $\hat{H}(\lambda)$  v blokově diagonálním tvaru vůči libovolně zvolené bázi nezávislé na  $\lambda$ . V takovém případě se zkoumaný Hilbertův prostor rozpadne na několik podprostorů invariantních vůči změně  $\lambda$  a vlastní stavy z různých podprostorů navzájem vůbec neinteragují.

### 3.2 Vlastní stavy v oblasti odvrácených křížení

V oblasti nejbližšího přiblížení hladin dochází k velmi radikálním a rychlým změnám vlastních stavů. Pro zkoumání tohoto jevu odvodíme vztah pro pravděpodobnost nalezení vlastního stavu  $|n\rangle$  příslušejícího  $n$ -té hladině hamiltoniánu  $\hat{H}(\lambda)$  ve vlastním stavu stejné hladiny hamiltoniánu  $\hat{H}(\lambda + \delta\lambda)$ , ten označíme  $|n'\rangle$ . Tato pravděpodobnost je dána vztahem

$$\mathcal{P}_n = |\langle n|n'\rangle|^2 = \langle n'|n\rangle \langle n|n'\rangle = \langle n'| \left( \mathbb{1} - \sum_{k \neq n} |k\rangle \langle k| \right) |n'\rangle = 1 - \sum_{k \neq n} |\langle k|n'\rangle|^2, \quad (3.4)$$

kde jsem pro úpravu využili relace úplnosti. Nyní rozvineme posunutý stav do prvního řádu v  $|n'\rangle \approx |n\rangle + \delta\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} |n\rangle$  a za skalární součiny dosadíme z rovnice (2.6).

$$\mathcal{P}_n \approx 1 - (\delta\lambda)^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{(E_n - E_k)^2} = 1 - (\delta\lambda)^2 \sum_{k \neq n} \frac{|f_{nk}|^2}{(E_n - E_k)^4} \quad (3.5)$$

Je tedy patrné, že v oblasti nejbližšího přiblížení hladin je jmenovatel v sumě předchozího výrazu velmi malý. Díky tomu malá změna parametru  $\lambda$  znamená velkou změnu vlnové funkce. Později si na modelovém systému ukážeme, že tyto změny jsou skutečně velmi rychlé a že vlastní stavy po odvráceném křížení mají navzájem prohozené tvary než měly původně.

### 3.3 Kde hledat odvrácená křížení?

Nejobvyklejší chování systému v závislosti na  $\lambda$  je takové, že se hladiny nejprve přibližují, až dosáhnou jistého bodu největšího zhuštění, a poté se opět rozlétnou do velkých vzdáleností. Při zkoumání jakéhokoliv systému se budeme zajímat především právě o oblast nejbližšího přiblížení hladin, protože v tomto místě se odehrávají všechny důležité změny.

Střední hodnotu energie můžeme spočítat ze stopy hamiltoniánu.

$$\bar{E} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_i = \frac{1}{N} \text{Tr} \hat{H} = \frac{1}{N} \left( \text{Tr} \hat{H}_0 + \lambda \text{Tr} \hat{V} \right) \quad (3.6)$$

Disperzi energií jednotlivých stavů spočítáme obvyklým způsobem.

$$\begin{aligned}
(\Delta E)^2 &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (E_i - \bar{E})^2 = \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_i^2 \right) - \bar{E}^2 = \\
&= \frac{1}{N^2} \left( N \operatorname{Tr} \hat{H}^2 - (\operatorname{Tr} \hat{H})^2 \right) = \frac{\lambda^2}{N^2} \left( N \operatorname{Tr} \hat{V}^2 - \operatorname{Tr}^2 \hat{V} \right) + \\
&+ \frac{2\lambda}{N^2} \left( N \operatorname{Tr}(\hat{H}_0 \hat{V}) - \operatorname{Tr} \hat{H}_0 \operatorname{Tr} \hat{V} \right) + \frac{1}{N^2} \left( N \operatorname{Tr} \hat{H}_0^2 - \operatorname{Tr}^2 \hat{H}_0 \right)
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Hledání oblasti největšího zhuštění stavů je pouhým hledáním extrému výrazu  $(\Delta E)^2$ . Stačí nám tedy vyřešit rovnici

$$\left. \frac{\partial}{\partial \lambda} (\Delta E)^2 \right|_{\lambda_0} = 0. \tag{3.8}$$

Z derivace na levé straně dostáváme obyčejnou lineární funkci, jejíž kořen

$$\lambda_0 = \frac{\operatorname{Tr} \hat{H}_0 \operatorname{Tr} \hat{V} - N \operatorname{Tr}(\hat{H}_0 \hat{V})}{N \operatorname{Tr} \hat{V}^2 - \operatorname{Tr}^2 \hat{V}} \tag{3.9}$$

je hledaným bodem extrému. V okolí bodu  $\lambda_0$  lze tedy očekávat výskyt odvrácených křížení a nejrychlejší změny v tvaru vlnových funkcí vlastních stavů.

## Dvuhladinové systémy

### 4.1 No crossing teorém v dimenzi 2

Uvažujme nyní dvuhladinový systém závisející na jediném reálném parametru  $\lambda$  určený hamiltoniánem

$$\hat{H}(\lambda) = \begin{pmatrix} e_1(\lambda) & v(\lambda) \\ v^*(\lambda) & e_2(\lambda) \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

Nalezení kořenů charakteristického polynomu odpovídá řešení prosté kvadratické rovnice.

$$p(\lambda, E) = E^2 - E[e_1(\lambda) + e_2(\lambda)] - |v(\lambda)|^2 + e_1(\lambda)e_2(\lambda) \quad (4.2)$$

$$E_{\pm}(\lambda) = \frac{e_1(\lambda) + e_2(\lambda)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{e_1(\lambda) - e_2(\lambda)}{2}\right)^2 + |v(\lambda)|^2} \quad (4.3)$$

Pro výskyt skutečného křížení hladin v bodě  $\lambda_0$  je třeba, aby výraz pod odmocninou ve vztahu (4.3) vymizel. To ale znamená, že je opět potřeba změnou jediného reálného parametru splnit několik nezávislých podmínek:

$$e_1(\lambda_0) = e_2(\lambda_0) \quad (4.4a)$$

$$\operatorname{Re}\{v(\lambda_0)\} = 0 \quad (4.4b)$$

$$\operatorname{Im}\{v(\lambda_0)\} = 0 \quad (4.4c)$$

Povšimněme si, že tyto podmínky je potřeba splnit nezávisle na tom, jaký charakter mají závislosti jednotlivých komponent hamiltoniánu (4.1).

### 4.2 Systémy závisející na více parametrech

Uvažujme nyní hamiltonián závisející lineárně na více reálných parametrech

$$\hat{H}(\lambda^{(1)}, \dots, \lambda^{(N)}) = \hat{H}_0 + \sum_{i=1}^N \lambda^{(i)} \hat{V}^{(i)}. \quad (4.5)$$

Vezmeme-li hamiltonián záviselý na dostatečném počtu parametrů, je zřejmě možné vždy najít náhodné degenerace energetických hladin. Co znamená *dostatečný* počet parametrů, záleží na symetrii hamiltoniánu. V případě obecného hermitovského hamiltoniánu je potřeba splnit všechny tři podmínky (4.4), a tedy jsou potřeba alespoň tři parametry. Pokud budeme uvažovat třídu reálných hamiltoniánů, je poslední podmínka  $\text{Im}\{v(\lambda_0)\} = 0$  triviálně splněna pro jakékoliv hodnoty parametrů a pro náhodné degenerace stačí pouze dva reálné parametry. Degenerace se mohou objevit i u systémů záviselých na méně parametrech (jak bylo diskutováno výše množina těchto systémů má nulovou míru).

Body, ve kterých dochází k náhodným degeneracím, se nazývají *diabolické*. Pojmenování souvisí s chováním energiových ploch v okolí bodu degenerace – ty mají typicky podobu kuželové plochy s vrcholem v bodě degenerace, přičemž každý z půlkuželů odpovídá jedné z hladin.

Pro demonstraci uvažujme systém určený reálným hamiltoniánem záviselým na dvou reálných parametrech, který má diabolický bod v bodě  $\boldsymbol{\lambda}_0 = (\lambda_0^{(1)}, \lambda_0^{(2)}) = (0, 0)$ . Toho lze dosáhnout jednoduše tak, že zvolíme neporušený hamiltonián nulový. Takto zvolený hamiltonián má obecně 6 stupňů volnosti a tvar

$$\hat{H}(\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}) = \hat{H}(\boldsymbol{\lambda}) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{e}_1 & \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{v} \\ \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{v} & \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{e}_2 \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

kde pro přehlednost byly maticové elementy zapsány pomocí skalárních součinů. Jednoduchým zobecněním vztahu (4.3) pro více parametrů dostáváme pro energie obou hladin

$$E_{\pm}(\boldsymbol{\lambda}) = \left( \frac{\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2}{2} \right) \cdot \boldsymbol{\lambda} \pm \sqrt{\left[ \left( \frac{\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2}{2} \right) \cdot \boldsymbol{\lambda} \right]^2 + [\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\lambda}]^2}. \quad (4.7)$$

Skutečnost, že výše uvedená rovnice určuje kuželovou plochu, lze snadno nahlédnout po lineární transformaci souřadnic předepsané následujícími vztahy:

$$x = \left( \frac{\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2}{2} \right) \cdot \boldsymbol{\lambda} \quad (4.8a)$$

$$y = \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\lambda} \quad (4.8b)$$

$$z = E - \left( \frac{\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2}{2} \right) \cdot \boldsymbol{\lambda} \quad (4.8c)$$

Tuto transformaci je možné provést pouze pokud jsou vektory  $\mathbf{v}$  a  $\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2$  lineárně nezávislé. Systémy, ve kterých tento požadavek není splněn, jsou speciálními případy systémů s vyšším stupněm degenerace hladin způsobené pravděpodobně nějakým druhem skryté symetrie, takové systémy nadále nebudeme uvažovat. V nových souřadnicích nabývá rovnice plochy (4.7) podoby  $z^2 = x^2 + y^2$ , to je již rovnice kuželové plochy s kruhovou podstavou a vrcholovým úhlem  $90^\circ$ .

### 4.3 Komplexní hodnota vnějšího parametru

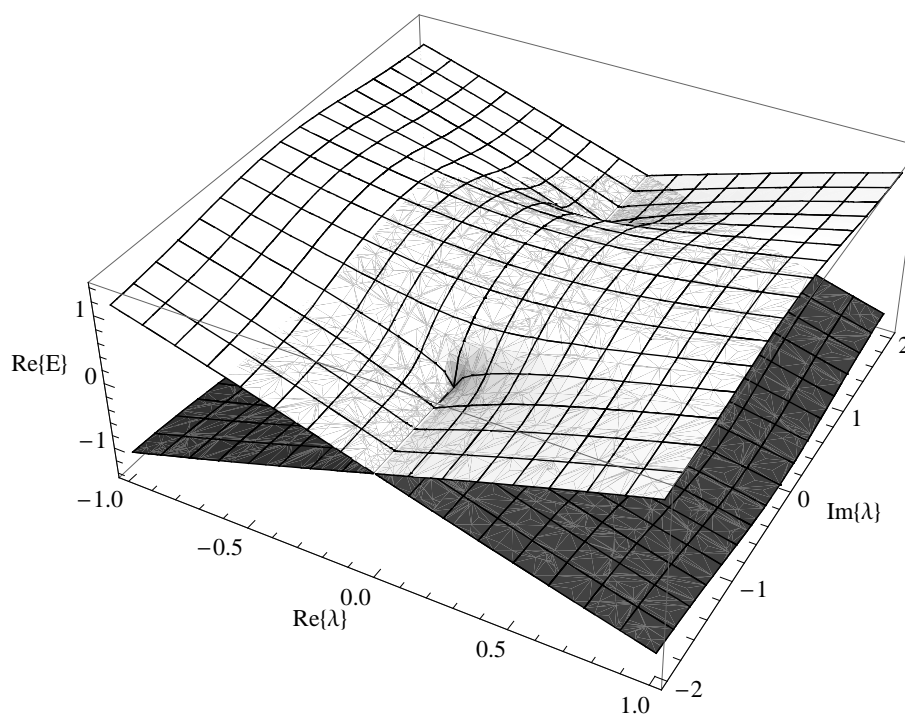
Než provedeme zobecnění vnějšího parametru na obor komplexních čísel, podívejme se nejprve na reálný hamiltonián závisující lineárně na jediném reálném parametru. Takový systém v dimenzi 2 je jednoznačně určen reálnými symetrickými maticemi  $H_0$  a  $V$ , každá z nich má zřejmě tři stupně volnosti. Vhodnou lineární transformací  $E$  a  $\lambda$  je vždy možné čtyři z těchto systém určujících konstant odstranit. Bez újmy na obecnosti nám tedy stačí zkoumat chování hamiltoniánu

$$\hat{H}(\lambda) = \begin{pmatrix} k\lambda & v \\ v & -k\lambda \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

kde  $v$  a  $k$  jsou kladné konstanty pro zbylé dva stupně volnosti. Dosazením do vztahu (4.3) dostáváme hodnoty energií obou hladin.

$$E_{\pm}(\lambda) = \pm \sqrt{(k\lambda)^2 + v^2} \quad (4.10)$$

Skutečné křížení hladin se může v systému objevit pouze ve speciálním případě  $v = 0$ , a to v bodě  $\lambda_0 = 0$ . Uvažujme nadále pouze systémy s  $v > 0$ , potom v bodě  $\lambda_0 = 0$  dochází pouze k odvrácenému křížení. Jedinou možností, jak vynulovat výraz pod odmocninou ve vztahu (4.10), je považovat parametr  $\lambda$  za komplexní číslo. Pojdme tedy podrobněji prozkoumat toto zobecnění vnějšího parametru.



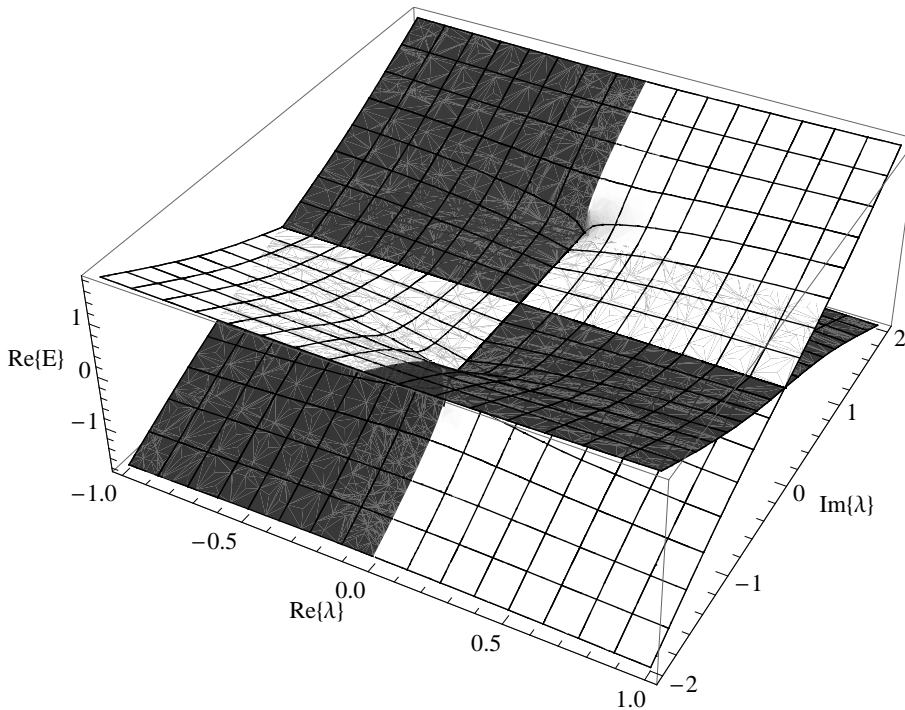
Obrázek 4.1: Závislost reálné složky energie první (bílá) a druhé (černá) hladiny.

Všimněme si, že pokud má  $\lambda$  imaginární složku, není hamiltonián (4.9) hermitovský operátor, tedy nepopisuje žádný fyzikální systém. Z tohoto poznatku také plyne, že vlastní čísla hamiltoniánu nemusí vždy nabývat reálných hodnot. K degeneraci hladin dochází v bodech  $\lambda_{0\pm} = \pm iv/k$ , v tomto případě se nazývají *větvící body*. Název opět souvisí s chováním komplexních energií v okolí těchto bodů.

Díky symetrii pod komplexním sdružením  $E^*(\lambda_{0+}) = E(\lambda_{0-})$  stačí zkoumat okolí pouze jednoho z větvících bodů.

$$\begin{aligned} E_{\pm}(\lambda_{0+} + \delta\lambda) &= \pm \sqrt{(iv + k\delta\lambda)^2 + v^2} = \\ &= \pm \sqrt{2ivk\delta\lambda + (k\delta\lambda)^2} \approx \sqrt{2ivk\delta\lambda} \end{aligned} \quad (4.11)$$

Při poslední úpravě jsme pod odmocninou zanedbali člen druhého řádu v  $\delta\lambda$ . Také jsme vynechali znaménka před odmocninou, jelikož jsou již obsažena v komplexní odmocnině, která má všude kromě nuly dvě různé hodnoty. V blízkém okolí větvících bodů je tedy možné aproximovat závislost energií komplexní odmocninou. Komplexní odmocnina má dvě jednoznačné větve, které lze znázornit pomocí Riemannovy plochy [5].



Obrázek 4.2: Závislost imaginární složky energie první (bílá) a druhé (černá) hladiny.

S výjimkou větvících bodů existují pro každé  $\lambda$  dvě odlišné hodnoty energie, můžeme tedy definovat první a druhou hladinu podmínkou  $\text{Re}\{E_1(\lambda)\} \geq \text{Re}\{E_2(\lambda)\}$ . Na obrázku č. 4.1, resp. obrázku č. 4.2 je vynesena závislost reálné, resp. imaginární složky energie obou hladin pro konkrétní systém s hodnotami  $k = v = 1$ . Na grafech

je v okolí větvičích bodů dobře vidět podobnost závislosti s komplexní odmocninou. Ze závislosti imaginárních složek energií je vidět, že z obou větvičích bodů vychází směrem od nuly polopřímky, v jejichž okolí je imaginární složka energie každé hladiny nespojitá. Pokud bychom chtěli, aby se energie při změně parametru  $\lambda$  měnila spojitě, musíme při přechodu přes zmiňované polopřímky vždy přeskočit z  $E_1$  na  $E_2$  a naopak.

## Modelový spinový systém

### 5.1 Popis systému

Jako modelový systém, na kterém budou demonstrovány některé výše probírané jevy, zvolíme systém tří spinů  $1/2$ . Hilbertův prostor v tomto případě tvoří direktní součin tří podprostorů spinu  $1/2$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{1/2}^{(1)} \otimes \mathcal{H}_{1/2}^{(2)} \otimes \mathcal{H}_{1/2}^{(3)}. \quad (5.1)$$

Bázi každého z trojice spinů tvoří dva stavy:  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ . Systém má zřejmě celkovou dimenzi  $2^3 = 8$ . Pro báze vektory celého systému zavedeme zkrácené značení typu  $|++-\rangle = |+\rangle^{(1)} \otimes |+\rangle^{(2)} \otimes |-\rangle^{(3)}$  (tedy první a druhý spin je ve stavu  $|+\rangle$  a třetí ve stavu  $|-\rangle$ ). V této notaci zapíšeme bázi celého systému a jednotlivé stavy očíslováme.

$$\begin{aligned} \mathcal{B} &= \{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle, |\varphi_4\rangle, |\varphi_5\rangle, |\varphi_6\rangle, |\varphi_7\rangle, |\varphi_8\rangle\} = \\ &= \{|-++\rangle, |+-+\rangle, |++-\rangle, |---\rangle, |+++ \rangle, |--+\rangle, |-+-\rangle, |+--\rangle\} \end{aligned} \quad (5.2)$$

Vzhledem k takto očíslované bázi budeme v dalších výpočtech zapisovat komponenty všech operátorů i vektorů na Hilbertově prostoru  $\mathcal{H}$ .

Uvažujme, že  $i$ -tému spinu ve stavu  $|+\rangle^{(i)}$  přísluší v neporušeném hamiltoniánu energie  $\varepsilon_i$  a stavu  $|-\rangle^{(i)}$  energie  $-\varepsilon_i$ . Neporušený hamiltonián za těchto podmínek nabývá diagonální podoby a jeho vlastní stavy jsou přímo báze vektory. Pro zkrácení zápisu ještě provedeme triviální přeznačení energií jednotlivých stavů.

$$\mathcal{E}_1 = -\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 \quad (5.3a)$$

$$\mathcal{E}_2 = \varepsilon_1 - \varepsilon_2 + \varepsilon_3 \quad (5.3b)$$

$$\mathcal{E}_3 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 \quad (5.3c)$$

$$\mathcal{E}_4 = -\varepsilon_1 - \varepsilon_2 - \varepsilon_3 \quad (5.3d)$$

Neporušený hamiltonián  $\hat{H}_0$  má tedy diagonální tvar:

$$\hat{H}_0 = \text{Diag}(\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \mathcal{E}_3, \mathcal{E}_4, -\mathcal{E}_4, -\mathcal{E}_3, -\mathcal{E}_2, -\mathcal{E}_1) \quad (5.4)$$

Báze  $\mathcal{F}(\lambda)$  složená z vlastních stavů  $\hat{H}(\lambda)$  díky volbě diagonálního  $\hat{H}_0$  splývá v bodě  $\lambda = 0$  s bází  $\mathcal{B}$ .

$$\mathcal{F}(0) = \{|1\rangle_0, |2\rangle_0, |3\rangle_0, |4\rangle_0, |5\rangle_0, |6\rangle_0, |7\rangle_0, |8\rangle_0\} = \mathcal{B} \quad (5.5)$$

V operátoru poruchy budeme využívat posunovacích operátorů  $\hat{J}_+$  a  $\hat{J}_-$ .

$$\hat{J}_+ = \frac{\hbar}{2} |+\rangle\langle -| \quad (5.6a)$$

$$\hat{J}_- = \frac{\hbar}{2} |-\rangle\langle +| \quad (5.6b)$$

Z posunovacích operátorů utvoříme dva typy poruchy, se kterými budeme nadále pracovat.

$$\hat{V}^{(ij)} = \frac{4}{\hbar^2} \left( \hat{J}_+^{(i)} J_-^{(j)} + J_-^{(i)} \hat{J}_+^{(j)} \right) \quad (5.7)$$

$$\hat{W}^{(ij)} = \frac{4}{\hbar^2} \left( \hat{J}_+^{(i)} J_+^{(j)} + J_-^{(i)} J_-^{(j)} \right) \quad (5.8)$$

Koeficient  $4/\hbar^2$  byl do obou operátorů přidán, aby se vykrátil s koeficientem před prvky báze v tenzorovém součinu posunovacích operátorů. Díky tomu budeme moci v dalších výpočtech používat rozumně naškálované hodnoty parametru  $\lambda$  a nebudeme se muset vůbec zabývat Planckovou konstantou.

Další zřejmou výhodou zvoleného systému je, že máme diagonální tvar neporušeného hamiltoniánu, naopak porucha  $\hat{V}^{(ij)}$ , resp.  $\hat{W}^{(ij)}$  má na diagonále samé nuly, díky tomu i součin  $\hat{H}_0 \hat{V}^{(ij)}$ , resp.  $\hat{H}_0 \hat{W}^{(ij)}$  má na diagonále samé nuly. Nuly na diagonále znamenají nulovou stopu a pokud ze vztahu (3.9) vypočteme, kde dochází k největšímu přiblížení hladin, vyjde nám že je to v okolí  $\lambda = 0$ .

Pro kreslení grafů a dalších výpočtů je možné využít například funkcí programu *Mathematica*. Jako dodatek je k práci přiložen kód notebooku, který byl v *Mathematice* pro tyto účely použit.

## 5.2 Porucha typu $\hat{V}^{(ij)}$

Uvažujme nejprve hamiltonián ve tvaru

$$\hat{H}_1(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda(a\hat{V}^{(12)} + b\hat{V}^{(13)} + c\hat{V}^{(23)}), \quad (5.9)$$

kde  $a$ ,  $b$  a  $c$  jsou reálná čísla udávající relativní sílu jednotlivých členů. Nejprve prozkoumáme chování systému s obecnými hodnotami  $a$ ,  $b$  a  $c$ , a později za ně dosadíme konkrétní hodnoty, stejně tak za jednotlivé energie v  $\hat{H}_0$ .

Dosažením za jednotlivé členy dostáváme maticové vyjádření hamiltoniánu

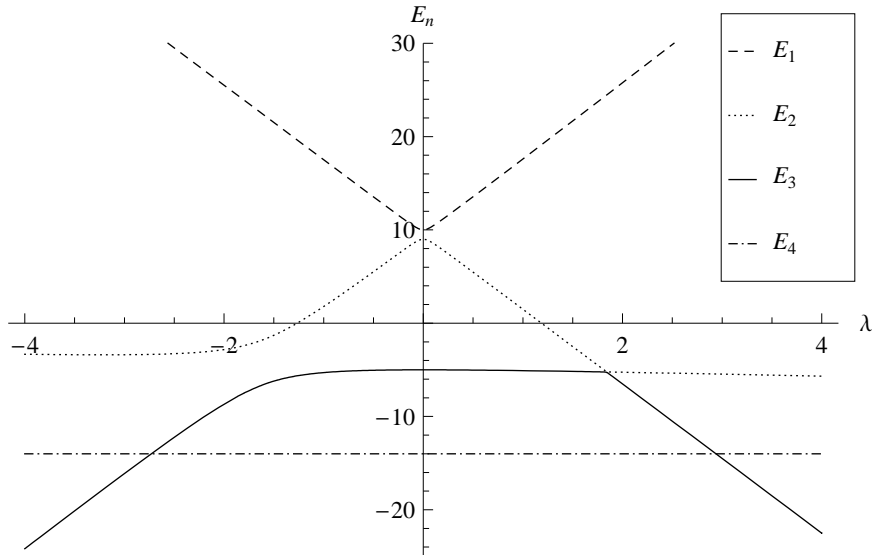
$$\hat{H}_1(\lambda) = \begin{pmatrix} \mathcal{E}_1 & a\lambda & b\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a\lambda & \mathcal{E}_2 & c\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b\lambda & c\lambda & \mathcal{E}_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathcal{E}_4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\mathcal{E}_4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\mathcal{E}_3 & c\lambda & b\lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c\lambda & -\mathcal{E}_2 & a\lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b\lambda & a\lambda & -\mathcal{E}_1 \end{pmatrix}. \quad (5.10)$$

Zvolený hamiltonián má evidentně blokově diagonální tvar, Hilbertův prostor se nám tak rozpadá na celkem čtyři podprostory. Interakce stavů z různých podprostorů je vyloučena, a lze tedy očekávat výskyt skutečných křížení hladin. Díky dalším symetriím ve volbě poruchy i neporušeného hamiltoniánu, se charakteristický polynom  $p(\lambda, E) = \det[\hat{H}_1(\lambda) - E\mathbb{1}]$  rozpadne na dva součinitele tak, že platí:

$$p_1(\lambda, E) = -q_1(\lambda, E) q_1(-\lambda, -E) \quad (5.11)$$

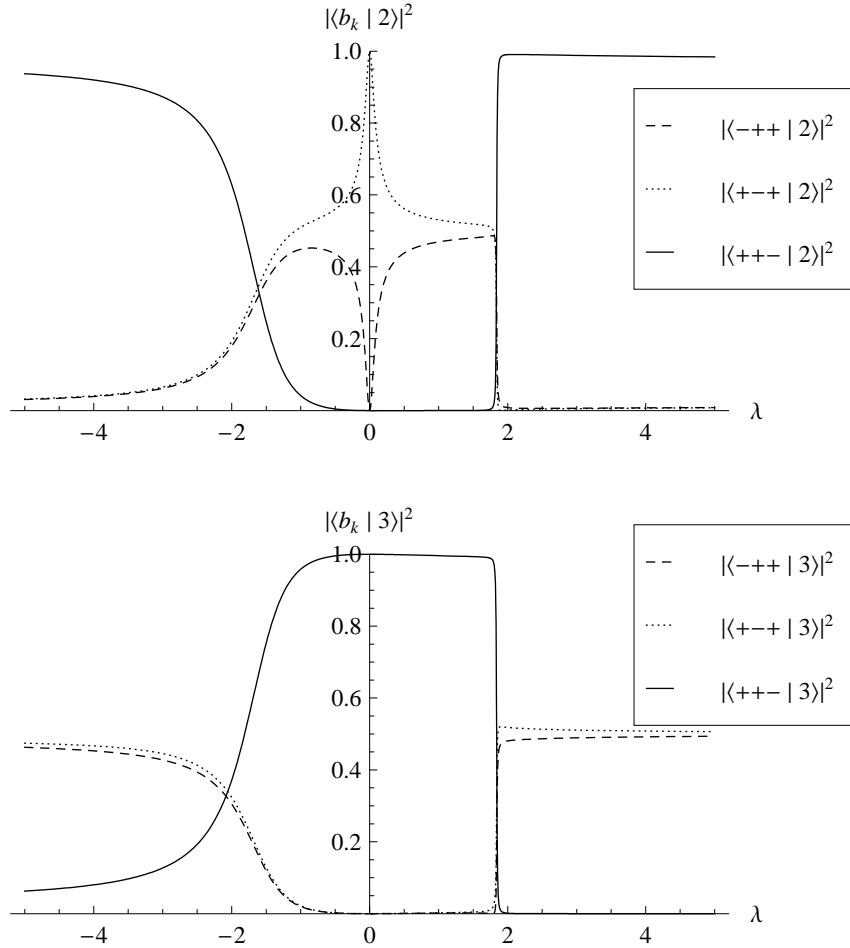
$$q_1(\lambda, E) = [E - \mathcal{E}_4][(E - \mathcal{E}_1)(E - \mathcal{E}_2)(E - \mathcal{E}_3) - 2abc\lambda^3 - b^2\lambda^2(E - \mathcal{E}_2) - c^2\lambda^2(E - \mathcal{E}_1) - a^2\lambda^2(E - \mathcal{E}_3)] \quad (5.12)$$

Zřejmě tedy stačí prozkoumat vývoj prvních čtyř hladin, jejichž energie jsou kořeny polynomu  $q_1(\lambda, E)$ . Zbylé čtyři hladiny se vyvíjejí po drahách, které mají stejný charakter, pouze mají opačné znaménko u hodnot energie a parametr  $\lambda$  běží opačným směrem.



Obrázek 5.1: Vývoj prvních čtyř hladin v systému s poruchou tvaru  $\hat{V}^{(ij)}$ .

Zkoumaný polynom má v  $\lambda = 0$  kořeny  $E_1(0) = \mathcal{E}_1$ ,  $E_2(0) = \mathcal{E}_2$ ,  $E_3(0) = \mathcal{E}_3$ ,  $E_4(0) = \mathcal{E}_4$ . Hodnota čtvrtého kořenu  $E_4$  evidentně nezávisí na  $\lambda$ , tuto skutečnost jsme mohli vytušit již z tvaru hamiltoniánu (5.10), ze kterého je vidět, že stav příslušející energii  $E_4$  žádným způsobem neinteraguje s ostatními stavy, a tudíž příslušná vlnová funkce i energie zůstávají konstantí pro všechna  $\lambda$ . Z tvaru hamiltoniánu můžeme dále vypočítat, že se navzájem odpuzují všechny dvojice hladin  $E_1$ ,  $E_2$  a  $E_3$  a sílu této odpudivé síly udávají pro každou dvojici konstanty  $a$ ,  $b$  a  $c$ .



Obrázek 5.2: Pravděpodobnost nalezení stavů báze  $\mathcal{B}$  ve vlastních stavech  $|2\rangle$  a  $|3\rangle$  příslušejících hamiltoniánu  $\hat{H}_1(\lambda)$ .

Nyní zvolíme konkrétní hodnoty všech konstant  $a$  a na vykreslených grafech ukážeme některé výše diskutované jevy. Jako vhodná volba se ukazují například:

$$a = 8 \qquad b = 1 \qquad c = 1 \qquad (5.13a)$$

$$\mathcal{E}_1 = 10 \qquad \mathcal{E}_2 = 9 \qquad \mathcal{E}_3 = -5 \qquad (5.13b)$$

Pro tyto konkrétní hodnoty je vynesena na obrázku č. 5.1 závislost energií  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $E_3$  a  $E_4$  na parametru  $\lambda$ . Pověsimně si, že čtvrtá hladina se volně kříží se třetí, to

odpovídá našemu očekávání – čtvrtá hladina s žádným dalším stavem neinteraguje. V grafu také můžeme najít několik odvrácených křížení, z nichž nejtěsnější přiblížení je mezi hladinami 2 a 3.

Podívejme se nyní, jak se s  $\lambda$  mění podoba vlastních stavů – z již prozkoumané závislosti energií se dá očekávat nejzajímavější chování u stavů příslušejících 2. a 3. hladině. Pravděpodobnosti nalezení stavů báze  $\mathcal{B}$  ve vlastních stavech  $|2\rangle$  a  $|3\rangle$  jsou vyneseny<sup>1</sup> v grafech na obrázku č. 5.2. Z těchto grafů je možné vypočítat několik zajímavých vlastností – zastoupení jednotlivých komponent v obou vlastních stavech se při odvráceném křížení hladin prohodí a tato výměna je tím rychlejší, čím těsnější je přiblížení hladin (stačí srovnat rychlost změn v okolí  $\lambda = -1,5$  a  $\lambda = 2$ ).

### 5.3 Porucha typu $\hat{V}^{(ij)}$ společně s $\hat{W}^{(ij)}$

Nyní se budeme zabývat lehce pozměněným hamiltoniánem z předchozího oddílu – doplněným o další typ poruchy na tvar

$$\hat{H}_2(\lambda) = \hat{H}_1(\lambda) + \lambda(\hat{W}^{(12)} + \hat{W}^{(13)} + \hat{W}^{(23)}). \quad (5.14)$$

Vývoj systému určeného tímto hamiltoniánem se v mnohém podobá vývoji diskutovanému výše. Hlavní odlišnost spočívá v zapojení i 4. stavu tak, že interaguje s prvními třemi hladinami.

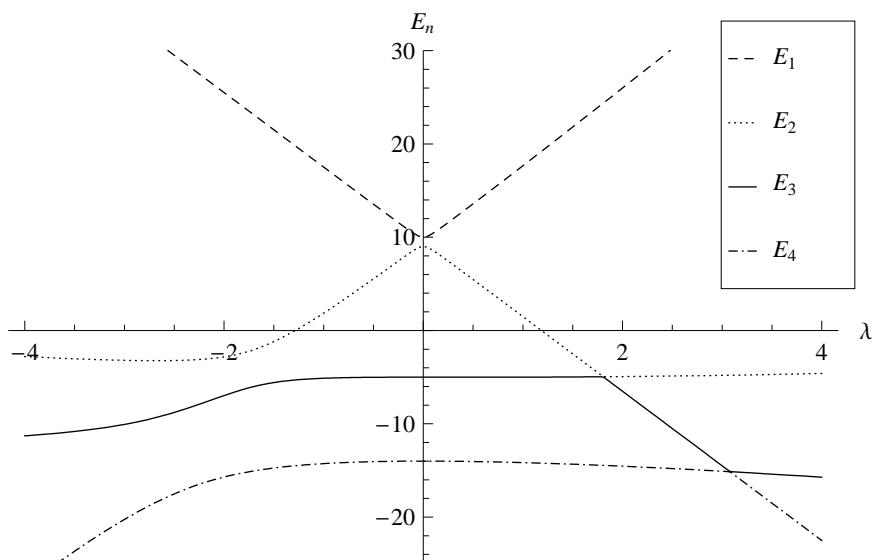
Hamiltonián zapsaný v maticovém tvaru má podobu

$$\hat{H}_2(\lambda) = \begin{pmatrix} \mathcal{E}_1 & a\lambda & b\lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a\lambda & \mathcal{E}_2 & c\lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b\lambda & c\lambda & \mathcal{E}_3 & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda & \mathcal{E}_4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\mathcal{E}_4 & \lambda & \lambda & \lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & -\mathcal{E}_3 & c\lambda & b\lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & c\lambda & -\mathcal{E}_2 & a\lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & b\lambda & a\lambda & -\mathcal{E}_1 \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

Stejně jako v předchozím případě má tento hamiltonián blokově diagonální tvar, nyní se však Hilbertův prostor rozpadá pouze na dva podprostory. Podobně jako v předchozím případě je možné charakteristický polynom rozdělit na dva podobné činitele. Z důvodu stejné symetrie jako v předchozím případě můžeme opět omezit naši analýzu systému na první čtyři hladiny. Nyní však nabývá polynom  $q_2(\lambda, E)$  poměrně složitějšího tvaru, proto budeme v dalších výpočtech již uvažovat konkrétní hodnoty konstant podle vztahů (5.13).

$$q_2(\lambda, E) = E^4 - E^2(69\lambda^2 + 201) - E(36\lambda^3 + 1197\lambda^2 - 380) + 32\lambda^4 - 266\lambda^3 - 4209\lambda^2 + 6300 \quad (5.16)$$

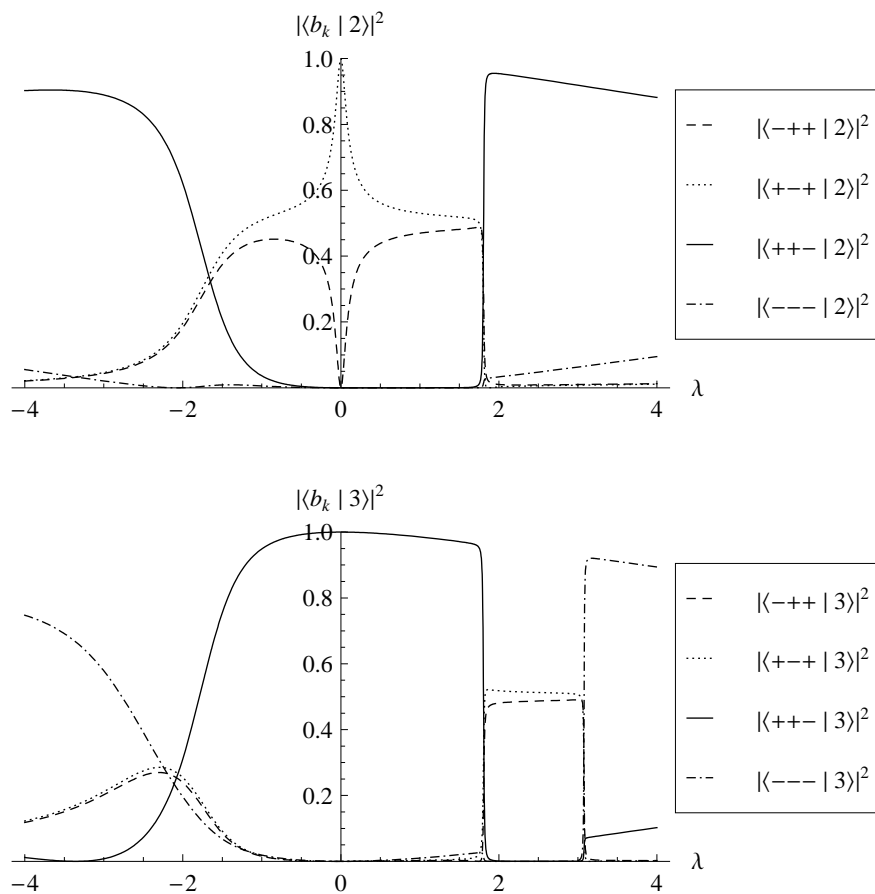
<sup>1</sup>Pravděpodobnosti, které jsou identicky nulové pro všechna  $\lambda$ , nejsou v grafech vyneseny.



Obrázek 5.3: Vývoj prvních čtyř hladin v systému s poruchou tvaru  $\hat{V}^{(ij)}$  a  $\hat{W}^{(ij)}$ .

Na obrázku č. 5.3 je vyneseno vývoj prvních čtyř hladin. Všimněme si, že pozměněný systém se nechová příliš odlišně od původního – dvě skutečná křížení třetí a čtvrté hladiny se proměnila na jedno odvrácené křížení s velmi těsným přiblížením obou hladin a jedno vzdálenější vyhnutí hladin, vývoj dalších dvou hladin zůstává velice podobný jako v systému určeném hamiltoniánem  $\hat{H}_1(\lambda)$ .

Podobně se změnila i závislost jednotlivých komponent vlastních stavů systému – na obrázku č. 5.4 jsou opět vyneseny závislosti komponent stavů  $|2\rangle$  a  $|3\rangle$ . Jelikož nyní mezi sebou interagují všechny čtyři hladiny, jsou na rozdíl od původního systému obecně nenulové celkem čtyři komponenty. Z grafů je patrné, že podobně jako se příliš nezměnila závislost hodnoty energie 2. stavu, tak se příliš nezměnila ani závislost komponent příslušného vlastního stavu. Závislosti komponent stavu  $|3\rangle$  jsou ale na první pohled velmi odlišné, vidíme zde zásadní změny související s výše zmíněnou proměnou skutečných křížení na odvrácená křížení hladin.



Obrázek 5.4: Pravděpodobnost nalezení stavů báze  $\mathcal{B}$  ve vlastních stavech  $|2\rangle$  a  $|3\rangle$  příslušejících hamiltoniánu  $\hat{H}_2(\lambda)$ .

## Závěr

Odvrácená křížení hladin hrají důležitou roli při vyšetřování závislosti struktury kvantového systému na vnějším parametru. V našem modelovém systému je možné vidět například z obrázku č. 5.1 a č. 5.2, že se vzrůstající hodnotou parametru  $\lambda$  se vlnová funkce hladiny  $|3\rangle$  téměř nemění až do místa ostrého odvráceného křížení s hladinou  $|2\rangle$ . Zde se tvar vlnových funkcí obou hladin navzájem vymění. Podobné jevy jsou zlášť důležité, prochází-li odvráceným křížením základní stav systému. V limitě nekonečné velikosti systému (tj. nekonečné dimenze) pak může docházet ke *kvantovým fázovým přechodům* [6].

Skutečná křížení komplexních energií (tzv. *větvící body*) v systémech závislých na komplexním parametru jsou studována kvůli jejich vlivu na vlastnosti systému s reálnými hodnotami kontrolního parametru, ale také proto, že v systémech s disipací nemusí být hamiltonián obecně hermitovský operátor [7].

Skutečnost, že se energetické hladiny v typickém případě navzájem nekříží, je dobře známa a studována ji mnoho let. Wigner a von Neumann [8] jako první dokázali *no crossing theorem* pro obecné hermitovské matice. Ve své práci také ukázali, že tvar obou vlnových funkcí se během odvráceného křížení vymění.

V této práci jsme studovali vývoj stacionárních stavů a jejich energií při změně vnějšího parametru, vůbec jsme se nezabývali skutečnou dynamikou systému a jeho vývojem v čase. Tento přístup nám umožnil bez zbytečných komplikací demonstrovat některé fundamentální jevy v systémech s vnějšími parametry. Mnoho aplikací mají však odvozené vztahy i v nestacionárních procesech, v takovém případě se vnější parametr nahradí obecně funkcí času, velmi často lineární závislostí. Zkoumané procesy se potom dělí na dvě skupiny - *adiabatické* (procesy, při nichž se mění parametr  $\lambda$  s časem velmi pomalu) a *diabatické* (naopak procesy, při nichž se vnější parametr mění velmi rychle). Jednou z nejstarších aplikací tohoto druhu je například *Landau-Zenerův vztah* pro pravděpodobnost diabatického přechodu mezi stavy v dvouhladinových systémech odvozený v [9] a [10]. Wheeler a Hill [11] tohoto vztahu využili při zkoumání rozpadu jader.

Díky podobnosti Pechukas-Yukawova modelu se systémem nabitých odpuzujících

cích se částic je možné použití metod klasické statistické fyziky a termodynamiky na vývoj systému pod změnami parametru  $\lambda$ . Rovnovážná statistická mechanika fiktivních částic dává výsledky, které se shodují s výsledky matematické teorie systémů gaussovských náhodných matic.

# Literatura

- [1] Pechukas P.: *Distribution of Energy Eigenvalues in the Irregular Spectrum*, Phys. Rev. Lett. **51** (1983) 943–946.
- [2] Yukawa T.: *New Approach to the Statistical Properties of Energy Levels*, Phys. Rev. Lett. **54** (1985) 1883–1886.
- [3] Stöckmann H.-J.: *Quantum chaos: an introduction*, Cambridge University Press (1999) 183–193.
- [4] Yukawa T.: *Lax form of the quantum mechanical eigenvalue problem*, Phys. Lett. A **116** (1986) 227–230.
- [5] Krantz S. G.: *Handbook of Complex Variables*, Springer (1999) 135–138.
- [6] Vojta M.: *Quantum phase transitions*, Rep. Prog. Phys. **66** (2003) 2069–2110.
- [7] Dembowski C. et al.: *Experimental Observation of the Topological Structure of Exceptional Points*, Phys. Rev. Lett. **86** (2001) 787–790.
- [8] von Neumann J., Wigner E.: *Physik. Zeitschr.* **30** (1929) 465.
- [9] Zener A.: *Non-adiabatic Crossing of Energy Levels*, Proc. Roy. Soc. A **137** (1932) 696.
- [10] Landau L. D.: *Zur theorie der energieubertragung. II*, Phys. Sov. Un. **2** (1932) 46–51.
- [11] Wheeler J. A., Hill D. L.: *Nuclear Constitution and the Interpretation of Fission Phenomena*, Phys. Rev. **89** (1953) 1102–1145.

## Mathematica notebook

```
(* Nacist balicky *)
Needs["PlotLegends`"];

(* Vymazat vsechny hodnoty parametru *)
Clear[L, En, E1, E2, E3, E4];

(* Definice dvou typu poruchy *)
V := {
  {0, a, b, 0, 0, 0, 0, 0},
  {a, 0, c, 0, 0, 0, 0, 0},
  {b, c, 0, 0, 0, 0, 0, 0},
  {0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0},
  {0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0},
  {0, 0, 0, 0, 0, 0, c, b},
  {0, 0, 0, 0, 0, c, 0, a},
  {0, 0, 0, 0, 0, b, a, 0}
};
W := {
  {0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0},
  {0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0},
  {0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0},
  {1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0},
  {0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1},
  {0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0},
  {0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0},
  {0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0}
};

(* Nastavit styly pro grafy *)
```

```

styl1 = {RGBColor[0, 0, 0], Thickness[Small]};
styl2 = {RGBColor[0, 0, 0], Thickness[Small],
  AbsoluteDashing[{3, 3}]};
styl3 = {RGBColor[0, 0, 0], Thickness[Small],
  AbsoluteDashing[{0.2, 2}]};
styl4 = {RGBColor[0, 0, 0], Thickness[Small],
  AbsoluteDashing[{3, 2, 0.2, 2}]};
cara1 = Graphics[{Line[{0, 0}, {1, 0}]}];
cara2 = Graphics[{AbsoluteDashing[{3, 3}], Line[{0, 0}, {1, 0}]}];
cara3 = Graphics[{AbsoluteDashing[{0.2, 2}],
  Line[{0, 0}, {1, 0}]}];
cara4 = Graphics[{AbsoluteDashing[{3, 2, 0.2, 2}],
  Line[{0, 0}, {1, 0}]}];
velikost = 340.2;
pomer = 0.5;

```

(\* Neporuseny hamiltonian \*)

```

H0 = {
  {E1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0},
  {0, E2, 0, 0, 0, 0, 0, 0},
  {0, 0, E3, 0, 0, 0, 0, 0},
  {0, 0, 0, E4, 0, 0, 0, 0},
  {0, 0, 0, 0, -E4, 0, 0, 0},
  {0, 0, 0, 0, 0, -E3, 0, 0},
  {0, 0, 0, 0, 0, 0, -E2, 0},
  {0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -E1}
};

```

(\* Vymazat vsechny hodnoty parametru \*)

```
Clear[a, b, c];
```

(\* Definice dvou hamiltonianu \*)

```

H1[L_] := H0 + L*V;
H2[L_] := H1[L] + L*W;

```

(\* Kde hledat odvracena krizeni \*)

```

deltaE1 =
  Tr[ Inner[Times, H1[L], H1[L]]] - (Tr[H1[L]])^2
deltaE2 = Tr[ Inner[Times, H2[L], H2[L]]] - (Tr[H2[L]])^2

```

(\* Jak vypadaji hamiltoniany v maticove podobě? \*)

```

MatrixForm[H1[L]]
MatrixForm[H2[L]]

```

```

(* Charakteristicky polynom H1 *)
charpol[L_, En_] := Det[H1[L] - En*IdentityMatrix[8]];
charpolfac = FactorList[charpol[L, En]]

(* Dosadit konkretni hodnoty *)
E1 = 10;
E2 = 9;
E3 = -5;
E4 = -E1 - E2 - E3;
a = 8;
b = 1;
c = 1;

(* Vykreslit prvni 4 hladiny a vlnove funkce H1 *)
hladiny = Eigenvalues[H1[L]];
Export["graf1.pdf",
  Plot[{hladiny[[5]], hladiny[[4]], hladiny[[3]],
    hladiny[[1]]}, {L, -4, 4}, PlotRange -> {-25, 30},
  ImageSize -> velikost, PlotStyle -> {styl2, styl3, styl1, styl4},
  LegendShadow -> {0, 0},
  AxesLabel -> {"\[Lambda]", "\!\(\*SubscriptBox[\"E\", \"n\"]\)\"},
  PlotLegend -> {"\!\(\*SubscriptBox[\"E\", \"1\"]\)\",
    "\!\(\*SubscriptBox[\"E\", \"2\"]\)\",
    "\!\(\*SubscriptBox[\"E\", \"3\"]\)\",
    "\!\(\*SubscriptBox[\"E\", \"4\"]\)\"},
  LegendPosition -> {0.6, 0}, LegendSize -> {0.3, 0.6}]];
stavy = Eigenvectors[H1[L]];
Do[stavy[[i]] = (stavy[[i]]/Norm[stavy[[i]]])^2, {i, {4, 3}}];
Export["graf2.pdf",
  Plot[{stavy[[4]][[1]], stavy[[4]][[2]], stavy[[4]][[3]]}, {L, -5,
    5}, PlotRange -> {0, 1}, ImageSize -> velikost,
  AspectRatio -> pomer, PlotStyle -> {styl2, styl3, styl1},
  LegendShadow -> {0, 0},
  AxesLabel -> {"\[Lambda]",
    "\[LeftAngleBracket]\!\(\*SubscriptBox[\"b\", \"k\"]\) \
\[VerticalSeparator] 2\[RightAngleBracket]\!\(\*SuperscriptBox[\"|\",
  \ \"2\"]\)\"},
  PlotLegend -> {"\[LeftAngleBracket]-+++ \[VerticalSeparator] 2\
\[RightAngleBracket]\!\(\*SuperscriptBox[\"|\", \"2\"]\)\",
    "\[LeftAngleBracket]+++ \[VerticalSeparator] 2\
\[RightAngleBracket]\!\(\*SuperscriptBox[\"|\", \"2\"]\)\",
    "\[LeftAngleBracket]++- \[VerticalSeparator] 2\

```

```

\[RightAngleBracket]\!\(\!*SuperscriptBox[\|"|\", \ "2\|\)\}],
  LegendPosition -> {0.4, -0.15}, LegendSize -> {0.5, 0.45}]];
Export["graf3.pdf",
  Plot[{stavy[[3]][[1]], stavy[[3]][[2]], stavy[[3]][[3]]}, {L, -5,
    5}, PlotRange -> {0, 1}, ImageSize -> velikost,
  AspectRatio -> pomer, PlotStyle -> {styl2, styl3, styl1},
  LegendShadow -> {0, 0},
  AxesLabel -> {"\[Lambda]",
    "\[LeftAngleBracket]\!\(\!*SubscriptBox[\ "b\ ", \ "k\|\)\) \
\[VerticalSeparator] 3\[RightAngleBracket]\!\(\!*SuperscriptBox[\|"|\",
  \ \ "2\|\)\)"}],
  PlotLegend -> {"\[LeftAngleBracket]-++ \[VerticalSeparator] 3\
\[RightAngleBracket]\!\(\!*SuperscriptBox[\|"|\", \ "2\|\)\)",
    "\[LeftAngleBracket]++ \[VerticalSeparator] 3\
\[RightAngleBracket]\!\(\!*SuperscriptBox[\|"|\", \ "2\|\)\)",
    "\[LeftAngleBracket]++- \[VerticalSeparator] 3\
\[RightAngleBracket]\!\(\!*SuperscriptBox[\|"|\", \ "2\|\)\)",
    LegendPosition -> {0.4, 0}, LegendSize -> {0.5, 0.45}]];

(* Charakteristicky polynom H2 *)
charpol[L_, En_] := Det[H2[L] - En*IdentityMatrix[8]];
charpolfac = FactorList[charpol[L, En]]

(* Vykreslit prvni 4 hladiny a vlnove funkce H2 *)
hladiny = Eigenvalues[H2[L]];
Export["graf4.pdf",
  Plot[{hladiny[[4]], hladiny[[3]], hladiny[[2]],
    hladiny[[1]]}, {L, -4, 4}, PlotRange -> {-25, 30},
  ImageSize -> velikost, PlotStyle -> {styl2, styl3, styl1, styl4},
  LegendShadow -> {0, 0},
  AxesLabel -> {"\[Lambda]", "\!\(\!*SubscriptBox[\ "E\ ", \ "n\|\)\)"}],
  PlotLegend -> {"!\(\!*SubscriptBox[\ "E\ ", \ "1\|\)\)",
    "\!\(\!*SubscriptBox[\ "E\ ", \ "2\|\)\)",
    "\!\(\!*SubscriptBox[\ "E\ ", \ "3\|\)\)",
    "\!\(\!*SubscriptBox[\ "E\ ", \ "4\|\)\)",
    LegendPosition -> {0.6, 0}, LegendSize -> {0.3, 0.6}]];
stavy = Eigenvectors[H2[L]];
Do[stavy[[i]] = (stavy[[i]]/Norm[stavy[[i]]])^2, {i, {1, 2, 3, 4}}];
Export["graf5.pdf",
  Plot[{stavy[[3]][[1]], stavy[[3]][[2]], stavy[[3]][[3]],
    stavy[[3]][[4]]}, {L, -4, 4}, PlotRange -> {0, 1},
  ImageSize -> velikost, AspectRatio -> pomer,
  PlotStyle -> {styl2, styl3, styl1, styl4}, LegendShadow -> {0, 0},

```

```

AxesLabel -> {"\[Lambda]",
  "\[LeftAngleBracket]\!\(\!*SubscriptBox[\\"b\", \\"k\"]\) \
\[VerticalSeparator] 2\[RightAngleBracket]\!\(\!*SuperscriptBox[\\"|\",
\ \\"2\"]\)\"},
PlotLegend -> {"\[LeftAngleBracket]-++ \[VerticalSeparator] 2\
\[RightAngleBracket]\!\(\!*SuperscriptBox[\\"|\", \\"2\"]\)\",
  "\[LeftAngleBracket]++ \[VerticalSeparator] 2\
\[RightAngleBracket]\!\(\!*SuperscriptBox[\\"|\", \\"2\"]\)\",
  "\[LeftAngleBracket]+- \[VerticalSeparator] 2\
\[RightAngleBracket]\!\(\!*SuperscriptBox[\\"|\", \\"2\"]\)\",
  "\[LeftAngleBracket]--- \[VerticalSeparator] 2\
\[RightAngleBracket]\!\(\!*SuperscriptBox[\\"|\", \\"2\"]\)\"},
LegendPosition -> {0.6, -0.3}, LegendSize -> {0.5, 0.6}];
Export["graf6.pdf",
Plot[{stavy[[2]][[1]], stavy[[2]][[2]], stavy[[2]][[3]],
  stavy[[2]][[4]]}, {L, -4, 4}, PlotRange -> {0, 1},
ImageSize -> velikost, AspectRatio -> pomer,
PlotStyle -> {styl2, styl3, styl1, styl4}, LegendShadow -> {0, 0},
AxesLabel -> {"\[Lambda]",
  "\[LeftAngleBracket]\!\(\!*SubscriptBox[\\"b\", \\"k\"]\) \
\[VerticalSeparator] 3\[RightAngleBracket]\!\(\!*SuperscriptBox[\\"|\",
\ \\"2\"]\)\"},
PlotLegend -> {"\[LeftAngleBracket]-++ \[VerticalSeparator] 3\
\[RightAngleBracket]\!\(\!*SuperscriptBox[\\"|\", \\"2\"]\)\",
  "\[LeftAngleBracket]++ \[VerticalSeparator] 3\
\[RightAngleBracket]\!\(\!*SuperscriptBox[\\"|\", \\"2\"]\)\",
  "\[LeftAngleBracket]+- \[VerticalSeparator] 3\
\[RightAngleBracket]\!\(\!*SuperscriptBox[\\"|\", \\"2\"]\)\",
  "\[LeftAngleBracket]--- \[VerticalSeparator] 3\
\[RightAngleBracket]\!\(\!*SuperscriptBox[\\"|\", \\"2\"]\)\"},
LegendPosition -> {0.6, -0.3}, LegendSize -> {0.5, 0.6}];

```