ПРОЯВЛЕНИЕ ГЕОМЕРИЧЕСКОЙ ФАЗЫ БЕРРИ В ДВУХСПИНОВЫХ СИСТЕМАХ

Пичугина Е.С.
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Квантовые системы описываются комплексными волновыми функциями $\Psi(r_i, t)$, с возможными фазовыми множителями типа $e^{i(\omega t+\varphi)}$ [1]. Однако, наличие фазового множителя не влияет на средние значения физических величин, рассчитанных с помощью этих волновых функций. Эволюция квантовомеханической системы, описываемой гамильтонианом *H,* изменяет волновую функцию, ее фазу, зависящую от времени *t*. В работах М. Берри [2] было показано, что в пределе адиабатического изменения параметров, общее изменение фазы волновой функции $(\omega t+\varphi)$ квантомеханической системы, после возвращения к начальным значениям, может отличаться от изменения динамической фазы ωt. Выяснилось, что при медленной циклической эволюции волновая функция системы $\Psi(r_i, t)$ приобретает фазовый множитель, содержащий, кроме тривиальной динамической фазы, дополнительную фазу, называемую, топологической или геометрической фазой Берри. Эта величина не зависит от продолжительности эволюции, а определятся геометрическими (топологическими) свойствами пространства измеряющихся параметров системы. Понятие фазы Берри изначально было введено для квантовой системы, изолированной от внешнего мира.

После пионерской работы Берри было опубликовано много работ, посвященных теоретическим и математическим аспектам эффектов геометрической фазы в различных идеализированных системах и результаты этих работ описаны в обзорах [2, 5, 8,]. Относительно небольшое число работ было посвящено изучению эффектов геометрической фазы в спиновых системах. Примерами таких работ являются эксперименты по спиновому резонансу в слабомодулированном магнитном поле [3], в ядерных квадрупольных резонансных спектрах медленно вращающихся образцов [4], а также в нейтронной оптике [5].

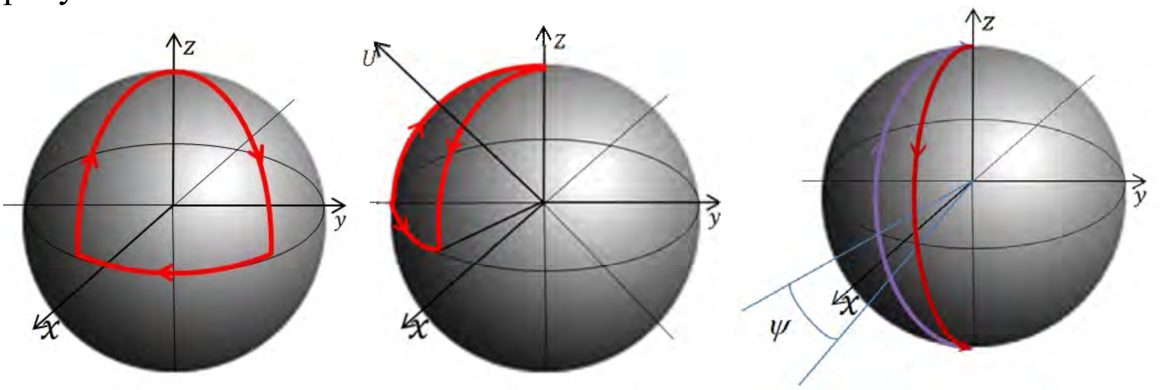
Интерес к эффектам геометрической фазы Берри в спиновых системах диктуется нескольким обстоятельствами. Во-первых, известно много физических и химических систем, поведение которых управляется действием спиновых правил отбора [6]. Во вторых, известно много красивых и полезных магнитных и спиновых эффектов, происхождение которых определяется динамикой систем, состоящих из двух или нескольких электронных спинов [7], В третьих, спиновые системы являются уникальным объектом для изучения новых эффектов геометрической фазы [8, 10], поскольку допускают ее экспериментальную регистрацию.

Своим происхождением спиновые эффекты обязаны действию двух фундаментальных физических законов – принципу Паули и закону сохранения углового момента, который выступает как закон сохранения суммарного спина в элементарных актах многих физико-химических процессах, таких как электрон-дырочная рекомбинация, рекомбинация заряженных частиц-электронов и ионов, рекомбинация свободных радикалов и др. Рекомбинация с образованием диамагнитной частицы, например, образование молекулярного водорода H_2 из двух атомов H возможна лишь в том случае, если электронные спины встречающихся атомов водорода находятся в суммарном синглетном состоянии с антипаралллельной ориентацией [9]

$$\left|S\right\rangle = 2^{-1/2}\left|a_1\beta_2 - \beta_1 a_2\right\rangle \quad (1)$$

В работе [10] показано, что изменение фазы вектора состояния (1) одного из электронных спинов такой коррелированной пары эквивалентно ее переходу в когерентную суперпозицию синглетного и триплетного состояний. Такой переход, очевидно, изменяет вероятность спинзависимой рекомбинации парамагнитных частиц. Этот пример показывает, что, используя свойства геометрической фазы Берри, можно управлять вероятностями элементарных актов различных физико-химических процессов и использовать эти эффекты и в химических реакциях, и в полупроводниковой спинтронике.

В нашей предыдущей работе [10] рассмотрены эффекты фазы Берри для различных замкнутых траекторий спиновой эволюции, которая в парах парамагнитных частиц эквивалентна синглет-триплетной конверсии. Вид траектории определяет фазу спиновой эволюции и изменяет вероятность рекомбинации радикалов. Показано, что поворот одного из спинов радикальной пары по замкнутой траектории подобен синглет триплетной конверсии. Были рассмотрены три различные траектории, представленные на рисунке 1.



а *б* *в*

Рис. 1. Повороты спина по различным замкнутым траекториям, изменяющим мультиплетность спиновой пары: *а)* поворот вокруг о сей X, Z, Y на углы $(-\pi/2)_X;(-\pi/2)_Z;(-\pi/2)_Y$; *б)* поворот спина на углы $(-\pi/2)_X;(\varphi)_Z;(-\pi/2)_U$; *в)* поворот спина на углы $(\pi)_X;(-\pi)_U$.

Последовательные повороты одного из спинов так, чтобы он двигался по замкнутой траектории и возвращался в исходное состояние, переводят радикальную пару в суперпозицию синглетного и триплетного состояний:

$$\left|S\right\rangle \Rightarrow \left|\Psi\right\rangle = c_1\left|S\right\rangle + c_2\left|T_0\right\rangle$$

коэффициенты c_1 и c_2 являются тригонометрическими функциями фазы Берри, появляющейся в результате циклической эволюции одного из спинов. Таким образом, показано, что поворот неполяризованного спина способен приводить к наблюдаемым эффектам, если этот спин изначально является партнером коррелированной спиновой пары. Первые две траектории трудно реализуемы в реальных экспериментах, т.к. поворот вокруг оси x связан с техническими трудностями поворота только одного спина. Поворот спина по траектории $(\pi)_X;(-\pi)_U$. реализуем в реальных экспериментах с помощью радиочастотных импульсов. Изменения вероятности рекомбинации $W_2 = Cos^2\varphi_1/2$ при поворотах спина типа 1*б* и $W_3 = Cos^2\varphi_2$ при поворотах спина типа 1*в* по замкнутым траекториям позволяет, в принципе, экспериментально определять величину геометрической фазы Берри.

Цели данной работы: *а)* показать существование замкнутых траекторий, для которых фаза Берри равна нулю и, следовательно, возможно эффективное «выключение» геометрической фазы; *б)* продемонстрировать возможность «обращения» спиновой эволюции, эквивалентной «обращению времени»; *в)* продемонстрировать новые возможности фазового управления магнитными и спиновыми эффектами.

Легко показать, что знак фазы Берри зависит от направления обхода замкнутой траектории: обход по часовой стрелке, наблюдаемый с внешней стороны сферы Пуанкаре, приводит к положительному знаку этой фазы, обход в противоположном направлении (против часовой стрелки) к отрицательному знаку. Таким образом, комбинируя замкнутые траектории с чередующимися направлениями обхода, можно получить суммарную траекторию, для которой суммарная фаза Берри равна нулю. Один из возможных примеров такой траектории приведен на рис. 2.

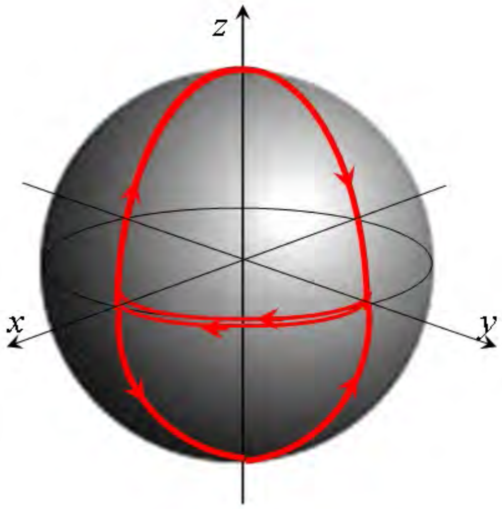


Рис.2. Суммарная замкнутая траектория, для которой геометрическая фаза Берри $\varphi = 0$.

Эта траектория начинается с «северного полюса», находящегося на оси OZ, и состоит из следующих элементов: поворот на угол π/2 вокруг оси OX, поворот на угол –π/2 вокруг оси OZ, затем поворот вокруг оси OY на угол π/2, поворот вокруг оси OX на угол π/2, поворот на угол –π/2 вокруг оси OZ и поворот вокруг оси OY на угол π/2 , этим поворотам соответствуют последовательные действия операторов:

$$R_i = R_y(-\pi/2)R_z(-\pi/2)R_x(\pi/2)R_y(\pi/2)R_z(-\pi/2)R_x(\pi/2),$$

Результат расчета показывает, что результирующий оператор равен единичному, для которого фазовый множитель, фаза Берри, равен нулю $\varphi = 0$. Очевидно, что такие траектории позволяют осуществить топологическое выключение геометрической фазы.

Зависимость знака геометрической фазы Берри от направления обхода позволяет использовать ее для компенсации эффектов динамической фазы $\varphi_d = \omega t$. Например, выбрать траекторию обхода так, чтобы фазовый сдвиг, обусловленный геометрией траектории, был равен $\varphi_g = -\omega\tau$ и отсутствовал суммарный фазовый эффект в момент времени τ.

Эффекты геометрической фазы можно использовать для «обращения» динамической эволюции двухспиновой системы во времени. Для этого необходимо выбрать геометрию траектории так, чтобы геометрическая фаза удовлетворяла условию $\varphi_g < -\omega\tau$. Тогда в момент времени τ суммарная фаза эволюции $\omega\tau + \varphi_g = \omega(\tau - \varphi_g/\omega) = \omega\tau'$, где $\tau' < 0$ и соответствует «отрицательному» течению времени *t*. Обращение динамической эволюции можно интерпретировать как обращение времени, в течение которого эволюционирует физическая система.

Результаты и выводы:

1. Движение неполяризованного спина по замкнутой траектории изменяет состояние спин-коррелированной пары в результате изменения геометрической фазы.
2. Выбор траектории спиновой эволюции позволяет выключать и включать эффекты геометрической фазы Берри в спин-зависимых процессах.
3. Эффекты геометрической фазы позволяют осуществлять обращение эволюции квантовых спиновых систем, эквивалентное «обращению времени».

Список литературы

1. ***А. Мессиа.*** *Квантовая механика.Том 2.М: 1979.*
2. ***Berry M.*** *V//Proc. Roy. Soc. Ser. F. 1984. V. 392. P. 45; Sci. American.*
3. ***Moody J., Shapere L.*** *// Phys. Rev. Ser. D. 1987. V. 35. P. 2597.*
4. ***Tycko R.*** *// Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. P. 22841.*
5. ***В.И. Бондарчук, Л.С. Давтян, Д.А. Корнеев*** *«Эффекты геометрической фазы в нейтронной оптике», УФН, Том 166, №2, 1996.*
6. ***А.Л. Бучаченко, Р.З. Сагдеев, К.М. Салихов*** *«Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях», Новосибирск, Наука, 1978.*
7. ***А.Л. Бучаченко*** *«Магнитные эффекты в химических реакциях», Успехи химии, 1976, т.45.*
8. ***В.К. Игнатович*** *«Фаза Бери для Нейтрона», УФН, Том 183, № 6, 2013.*

9. ***Pichugina E, Kultaeva A, Berdinskiy V*** *// Spin selective recombination as the source of hyperfine excitation in hydrogen atoms. Effects of magnetic field. Book of abstracts 9 th Meeting "NMR I heterogeneous systems"9-13 July, 2012. Saint Petersburg, Russia.*
10. ***Пичугина Е.С.*** *«Геометрическая фаза Бери в спин-зависимых системах» // Всероссийская научно-методическая конференция «Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры», 30.01-1.02 2013, г. Оренбург.*