

XI. PORUCHY ZÁVISLÉ NA ČASE . PŘECHODY

1. Formulace úlohy

Ústředním tématem této kapitoly je výpočet pravděpodobnosti přechodu soustavy z jednoho stacionárního stavu do druhého pod vlivem nějaké vnější, na čas závislé, poruchy. S úlohami tohoto typu se v praxi setkáváme velice často. Značná část experimentů je totiž uspořádána tak, že na zkoumanou fyzikální soustavu působíme nějakými vnějšími vlivy (elektrickým, magnetickým nebo elektromagnetickým polem apod.) a sledujeme odezvu soustavy na působící vnější podněty. Vyhodnocení experimentu pak spočívá ve vytvoření modelu studované soustavy, vypočítání reakce modelu na působící vnější vlivy a porovnání s naměřenými hodnotami; přijatelný souhlas vypočtených a naměřených hodnot pak svědčí ve prospěch přijatého modelu.

Připomenme si ještě, že v jednoduché podobě jsme již úlohu tohoto typu řešili v odst. VI.2.3; výsledkem provedených výpočtů tam byla tzv. Rabiho formule. Problém, který budeme řešit nyní, je mnohem obecnější. Budeme uvažovat systémy s libovolným počtem diskretních stavů (v odst. VI.2.3 jsme měli soustavu pouze se dvěma stavy), případně i se spojitým spektrem. Porucha $W(t)$, působící na takovou soustavu, bude libovolnou funkcí času. Na druhé straně je ovšem pochopitelné, že při tak obecném přístupu bude možné získávat pouze přibližná řešení.

Mějme tedy kvantovou soustavu s hamiltoniánem \mathcal{H}_0 a označme jeho vlastní hodnoty E_n a vlastní funkce φ_n , takže platí

$$\mathcal{H}_0 \varphi_n = E_n \varphi_n \quad (1)$$

Pro jednoduchost budeme nejprve předpokládat, že spektrum je diskretní a nedegenerované; zobecnění není obtížné a bude provedeno později.

Nechť v čase $t=0$ začne na soustavu působit nějaká porucha $W(t)$. Výsledný hamiltonián pak je

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + W(t) \quad (2a)$$

Z obdobných důvodů jako v předchozí kapitole, zavedeme bezrozměrný reálný parametr $\lambda \leq 1$ a budeme psát místo (2a)

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \lambda W(t) \quad (2b)$$

Energie reprezentovaná operátorem $W(t)$ je pro $t < 0$ rovna nule.

Předpokládejme dále, že v čase $t=0$ byla soustava ve stavu φ_i s energií E_i . Jestliže začala v $t=0$ působit porucha $W(t)$, stav φ_i již nebude obecně vlastním stavem porušeného hamiltoniánu $\mathcal{H}(t)$. V dalším se zaměříme na výpočet pravděpodobnosti, že v čase $t > 0$ bude soustava nalezena v nějakém stavu φ_f s energií E_f . Jinými slovy: budeme se zabývat přechody mezi stacionárními stavy neporušené soustavy, indukovanými poruchou.

Pouhá formulace úlohy je snadná. V čase $t > 0$ se stav soustavy vyvíjí ve shodě se Schrödingerovou rovnicí (IV.83)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = [\mathcal{H}_0 + \lambda W(t)] \psi(t), \quad (3)$$

která má s počáteční podmínkou

$$\psi(t=0) = \varphi_i \quad (4)$$

jediné řešení.

Hledaná pravděpodobnost $P_{if}(t)$, že soustava bude v čase t ve stavu φ_f je (viz (IV.73))

$$P_{if}(t) = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \int \varphi_f^* \psi(t) d\tau \right|^2 \quad (5)$$

K výpočtu $P_{if}(t)$ je tudíž třeba nalézt řešení rovnice (3), které vyhovuje podmínce (4). Přesné řešení je obecně nemožné, takže opět přichází ke slovu přibližné metody. V dalším budeme hledat $\psi(t)$ ve tvaru mocninové řady v λ a vypočteme explicitně $\psi(t)$ i $P_{if}(t)$ v přiblížení 1. řádu (vzhledem k λ). Získané obecné formule budeme pak aplikovat na dva důležité speciální případy: poruchu měnící se v čase periodicky a poruchu působící jen po určitou dobu, avšak během této doby konstantní. V následující kapitole si ještě podrobněji všimneme důležitého tématu - interakce atomu s elektromagnetickým polem.

2. Přibližné řešení

Rozvíme hledanou funkci $\psi(t)$ podle vlastních funkcí operátoru \mathcal{H}_0 :

$$\psi(t) = \sum_k c_k(t) \varphi_k \quad (6)$$

Časová závislost $\psi(t)$ je soustředěna v koeficientech $c_k(t)$, pro něž platí (srov. (IV.8))

$$c_k(t) = \langle \varphi_k | \psi(t) \rangle \quad (7)$$

Rovnice pro koeficienty $c_k(t)$ získáme obvyklým postupem. Rozvoj (6) dosadíme do (3), místo $\mathcal{H}_0 \varphi_k$ dosadíme podle (1) $E_k \varphi_k$, levou i pravou stranu rovnice vynásobíme funkcí φ_n^* a zintegrujeme přes celý prostor proměnných ve funkcích φ (provedeme tím vlastně projekci obou stran rovnice (3) na stav φ_n ; srov. díl I, str. 108). Označíme-li

$$W_{nk}(t) = \langle \varphi_n | W(t) | \varphi_k \rangle = \int \varphi_n^* W(t) \varphi_k d\tau \quad (8)$$

a využijeme ještě podmínku ortonormality vlastních funkcí operátoru \mathcal{H}_0 :

$$\langle \varphi_n | \varphi_k \rangle = \int \varphi_n^* \varphi_k d\tau = \delta_{nk} \quad (9)$$

obdržíme soustavu rovnic

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t) + \sum_k \lambda W_{nk}(t) c_k(t) \quad (10)$$

Rovnice v soustavě (10) jsou vzájemně "svázané" přes maticové prvky W_{nk} . Jestliže by všechny prvky W_{nk} byly nulové (porucha W by nepůsobila), rovnice by byly vzájemně nezávislé a jejich řešení by bylo

$$c_n(t) = b_n e^{-iE_n t/\hbar} \quad (11)$$

Jestliže jsou prvky W_{nk} obecně nenulové, ale porucha je slabá, očekáváme, že řešení $c_n(t)$ rovnic (10) se bude málo lišit od (11). Jinými slovy: napíšeme-li

$$c_n(t) = b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (12)$$

potom by $b_n(t)$ měla být funkce měnící se s časem jen velmi málo. Dosazením (12) do (10) obdržíme

$$\begin{aligned} i\hbar e^{-iE_n t/\hbar} \frac{d}{dt} b_n(t) + E_n b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} &= \\ = E_n b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} + \sum_k \lambda W_{nk} b_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \end{aligned}$$

Vynásobíme-li obě strany $\exp(+iE_n t/\hbar)$ a zavedeme

$$\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar}, \quad (13)$$

máme

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n(t) = \lambda \sum_k e^{i\omega_{nk} t} W_{nk}(t) b_k(t) \quad (14)$$

Zatím jsme neprovedli žádnou aproximaci, takže soustava rovnic (14) je ekvivalentní Schrödingerově rovnici (3).

Rozvedeme nyní $b_n(t)$ v řadu podle mocnin λ

$$b_n(t) = b_n^{(0)}(t) + \lambda b_n^{(1)}(t) + \lambda^2 b_n^{(2)}(t) + \dots \quad (15)$$

Rozvoj dosadíme do rovnic (14) a napíšeme podmínky, že koeficienty u λ^r ($r=0,1,2,\dots$) na obou stranách rovnice se musí sobě rovnat:

(a) pro $r=0$ dostaneme

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n^{(0)}(t) = 0, \quad (16)$$

takže $b_n^{(0)}$ nezávisí na t a pro $\lambda=0$ dostáváme výsledek (11).

(b) pro $r \neq 0$ získáme

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n^{(r)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk} t} W_{nk}(t) b_k^{(r-1)}(t) \quad (17)$$

Získané rovnice (17) zřejmě dovolují iterační řešení. Koeficienty $b_n(t)$ v aproximaci $(r-1)$ -řádu dosadíme na pravou stranu a řešením získaných diferenciálních rovnic 1.řádu obdržíme b_n v aproximaci r -tého řádu. Celý proces začneme s koeficienty $b_n^{(0)}$ vybranými tak, aby byla splněna počáteční podmínka (4).

Řešení v aproximaci 1.řádu

Předpokládali jsme, že pro $t < 0$ je soustava ve stacionárním stavu ψ_1 . Z toho ale plyne, že všechny koeficienty $b_n(t)$, kromě $b_1(t)$, musí být pro $t < 0$ rovny nule (b_1 je navíc konstantní), takže

$$b_n(t=0) = \delta_{ni} \quad (18)$$

Protože v čase $t=0$ to musí být pravda pro všechna λ , platí pro koeficienty rozvoje (15)

$$b_n^{(0)}(t=0) = \delta_{ni} \quad (19a)$$

$$b_n^{(r)}(t=0) = 0 \quad \text{pro } r \gg 1 \quad (19b)$$

Rovnice (16) pak pro všechna $t > 0$ dává řešení v nulté aproximaci

$$b_n^{(0)}(t) = \delta_{ni} \quad (20)$$

Dosadíme-li ho na pravou stranu (17), obdržíme pro $r=1$

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n^{(1)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk} t} W_{nk}(t) \delta_{ki} = e^{i\omega_{ni} t} W_{ni}(t), \quad (21)$$

což je diferenciální rovnice, kterou lze bez problémů integrovat. Vezme-li ještě v úvahu počáteční podmínku (19b), máme

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni} t'} W_{ni}(t') dt' \quad (22)$$

Dosadíme-li (20) a (22) do (12) a potom ještě do (6), získáme hledanou vlnovou funkci $\psi(t)$ v čase t , vypočtenou v přiblížení 1.řádu (vzhledem k parametru λ).

Spojení (5) a (7) dává pravděpodobnost $P_{if}(t)$ přechodu ze stavu ψ_i do stavu ψ_f rovnu $|c_f(t)|^2$. Protože $|c_f(t)| = |b_f(t)|$

$$P_{if}(t) = |b_f(t)|^2 \quad (23)$$

kde $b_f(t)$ je vyjádřeno rozvojem (15) ($n \neq f$). Je-li koncový stav ψ_f odlišný od ψ_1 , je $b_f^{(0)}(t)=0$ a

$$P_{if}(t) = \lambda^2 |b_f^{(1)}(t)|^2 \quad (24)$$

Dosazením z (22) dostaneme (pro $\lambda = 1$) 1. přiblížení pro hledanou pravděpodobnost přechodu ze stavu ψ_i do stavu ψ_f za čas t

$$P_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} W_{fi}(t') dt' \right|^2 \quad (25)$$

3. Dva významné speciální případy: periodická a konstantní porucha

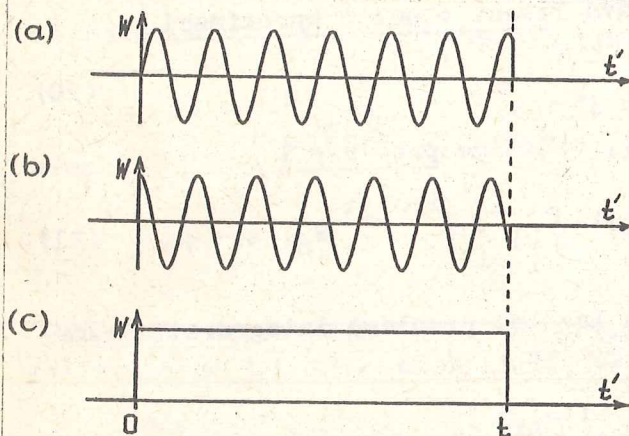
Budeme nyní aplikovat předchozí výsledky na dva konkrétní typy poruch: poruchu periodickou v čase a její speciální případ - poruchu v daném časovém intervalu konstantní.

3.1) Aplikace obecných formulí

Předpokládejme, že porucha $W(t)$ má jednu z těchto dvou jednoduchých závislostí na čase:

$$W(t) = w \sin \omega t \quad (26a)$$

$$W(t) = w \cos \omega t \quad (26b)$$



Obr.53

Znárodnění uvažovaných poruch. $W(t')$ má uvedený průběh pro $t' \in \langle 0, t \rangle$, vně tohoto intervalu je $W(t') = 0$. (a) porucha (26a), (b) porucha (26b), (c) speciální případ (26b) pro $\omega = 0$; porucha konstantní pro $t' \in \langle 0, t \rangle$.

Ve výrazech (26) je w na čase nezávislá měřitelná veličina a ω je konstantní kruhová frekvence (obr.53). S podobnými poruchami se ve fyzice setkáváme často; hned v následující kapitole se např. budeme podrobněji zabývat interakcí atomu s monochromatickou elektromagnetickou vlnou.

Pro poruchu (26a) má maticový prvek W_{fi} (v (8) se integruje přes prostorové (resp. i spinové) souřadnice, nikoliv přes t !) tvar

$$W_{fi}(t) = w_{fi} \sin \omega t = \frac{w_{fi}}{2i} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) \quad (27)$$

kde w_{fi} je obecně komplexní, na čase nezávislé, číslo.

Vypočtíme nyní vlnovou funkci v přiblížení 1. řádu. Dosazením (27) do obecného vzorce (22) získáme

$$b_n^{(1)}(t) = -\frac{w_{ni}}{2\hbar} \int_0^t [e^{i(\omega_{ni}+\omega)t'} - e^{i(\omega_{ni}-\omega)t'}] dt'$$

Výpočet integrálu je snadný a dá výsledek

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{w_{ni}}{2i\hbar} \left[\frac{1 - e^{i(\omega_{ni}+\omega)t}}{\omega_{ni} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{ni}-\omega)t}}{\omega_{ni} - \omega} \right] \quad (28)$$

Pravděpodobnost přechodu ze stavu ψ_i do stavu ψ_f za čas t je podle (24)

$$P_{if}(t; \omega) = |b_f^{(1)}(t)|^2 = \frac{|w_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 \quad (29a)$$

(U P_{if} je explicitně vypsán parametr ω , aby se zřetelně zdůraznila závislost na frekvenci poruchy.)

Jestliže vybereme poruchu (26b), změní se jen znaménko mezi zlomky z - na +, takže

$$P_{if}(t; \omega) = \frac{|w_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} + \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 \quad (29b)$$

Význam tohoto řešení je v tom, že porucha (26b) pro $\omega = 0$ dává poruchu nezávislou na čase (obr.53c). Pravděpodobnost přechodu indukovaná časově konstantní poruchou ($W(t)=w$ pro $t > 0$) se tudíž získá z (29b) dosazením $\omega = 0$:

$$P_{if}(t) = \frac{|w_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{if}^2} \left| 1 - e^{i\omega_{fi}t} \right|^2 = \frac{|w_{fi}|^2}{\hbar^2} F(t, \omega_{fi}) \quad (30)$$

kde (po jednoduché úpravě)

$$F(t, \omega_{fi}) = \left[\frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}/2} \right]^2 \quad (31)$$

Fyzikální obsah formulí (29), (30) rozebereme nejprve pro dva diskretní stavy ψ_i , ψ_f a potom pro případ, kdy koncový stav ψ_f patří do kontinua stavů.

3.2) Přechody mezi dvěma diskretními stavy

Pro pevné t je pravděpodobnost přechodu $P_{if}(t; \omega)$ funkcí proměnné ω . Uvidíme, že tato funkce má maximum pro

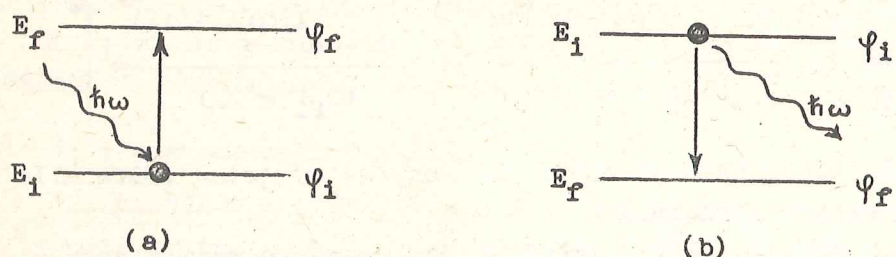
$$\omega = \omega_{fi} \quad (32a)$$

nebo pro

$$\omega = -\omega_{fi} \quad (32b)$$

Objevuje se nám tedy jakýsi rezonanční jev, jestliže se frekvence poruchového pole rovná Bohrově frekvenci ω_{fi} pro stavy ψ_i , ψ_f .

Vybereme-li $\omega \geq 0$, potom relace (32) dávají rezonanční podmínku pro $\omega_{f1} > 0$, resp. $\omega_{f1} < 0$. V prvním případě ($\omega_{f1} > 0$) přechází soustava ze stavu s nižší energií E_i do stavu s vyšší energií E_f (srov.(13)), takže jde o rezonanční absorpci kvanta $\hbar\omega$ (obr.54a). Ve druhém případě ($\omega_{f1} < 0$) stimuluje porucha přechod s vyšší hladiny E_i na nižší hladinu E_f ; přechod je doprovázen indukovanou emisí kvanta $\hbar\omega$ (obr.54b). Všimněme si podrobněji prvního případu s tím, že analogické řešení druhého případu ponecháme za cvičení.



Obr.54

Schematické znázornění vzájemné polohy energií E_i, E_f (pro stavy ψ_i, ψ_f). (a) Pro $E_f > E_i$ dochází absorpcí kvanta $\hbar\omega$ k přechodu $\psi_i \rightarrow \psi_f$. (b) Pro $E_i > E_f$ je přechod $\psi_i \rightarrow \psi_f$ spojen s indukovanou emisí kvanta $\hbar\omega$. V obou případech je $\omega \approx \omega_{f1}$.

Výraz pro P_{if} podle (29) je úměrný čtverci modulu dvou komplexních sčítanců:

$$A_+ = \frac{1 - e^{i(\omega_{f1} + \omega)t}}{\omega_{f1} + \omega} = -i \exp\left[\frac{i(\omega_{f1} - \omega)t}{2}\right] \frac{\sin[(\omega_{f1} + \omega)t/2]}{(\omega_{f1} + \omega)/2} \quad (33a)$$

$$A_- = \frac{1 - e^{i(\omega_{f1} - \omega)t}}{\omega_{f1} - \omega} = -i \exp\left[\frac{i(\omega_{f1} - \omega)t}{2}\right] \frac{\sin[(\omega_{f1} - \omega)t/2]}{(\omega_{f1} - \omega)/2} \quad (33b)$$

Jmenovatel výrazu A_- jde pro $\omega \rightarrow \omega_{f1}$ k nule. Proto pro ω blízká k ω_{f1} budeme uvažovat pouze člen A_- a budeme o něm mluvit jako o rezonančním členu (člen A_+ převezme tuto roli pro ω jdoucí k $-\omega_{f1}$).

Uvažujme nyní případ, kdy

$$|\omega - \omega_{f1}| \ll |\omega_{f1}| \quad (34)$$

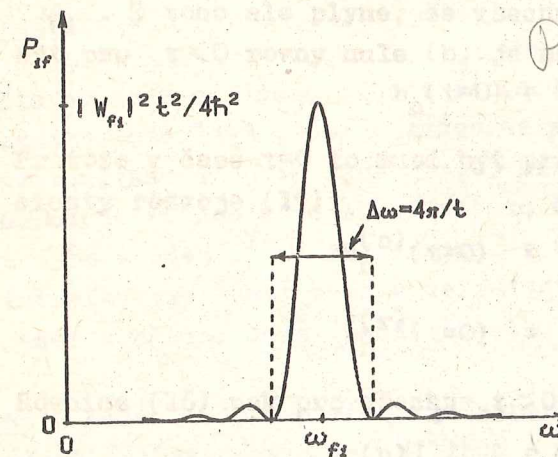
a zanedbejme "antirezonanční" člen A_+ . S výrazem (33b) dostaneme

$$P_{if}(t; \omega) = \frac{|w_{f1}|^2}{4\hbar^2} F(t, \omega - \omega_{f1}) \quad (35)$$

kde

$$F(t, \omega - \omega_{f1}) = \left[\frac{\sin[(\omega_{f1} - \omega)t/2]}{(\omega_{f1} - \omega)/2} \right]^2 \quad (36)$$

Závislost $P_{if}(t; \omega)$ na ω pro pevné t je v obr.55; je z něho zřetelně vidět rezonanční charakter pravděpodobnosti přechodu. Pravděpodobnost P_{if} nabývá maxima pro $\omega = \omega_{f1}$, kdy je rovna $|w_{f1}|^2 t^2 / 4\hbar^2$ a pro ω vzdalující se od ω_{f1} je výrazně menší, osciluje a má průběh připomínající difrakční závislosti z optiky.



Periodická porucha

Obr.55

Závislost pravděpodobnosti přechodu P_{if} (v 1. aproximaci) na frekvenci ω "sinusové" poruchy (26a) pro dané t . Pro $\omega \approx \omega_{f1}$ se objevuje rezonance úměrná t^2 , jejíž šířka je úměrná $1/t$.

Za povšimnutí stojí souvislost mezi šířkou $\Delta\omega$ hlavního maxima P_{if} a relacemi neurčitosti. Šířku rezonančního maxima $\Delta\omega$ můžeme přibližně definovat jako vzdálenost dvou nulových bodů P_{if} , nejbližších $\omega = \omega_{f1}$. Uvnitř tohoto intervalu nabývá P_{if} největší hodnoty; není těžké ověřit, že nejbližší sousední maxima (viz obr.55), v bodech pro něž je $(\omega - \omega_{f1})t/2 = 3\pi/2$, jsou rovna $|w_{f1}|^2 t^2 / 9\pi^2 \hbar^2$, což je méně než 5% P_{if} v bodě $\omega = \omega_{f1}$. Vezměme tedy

$$\Delta\omega \approx \frac{4\pi}{t} \quad (37)$$

Čím delší čas působení poruchy, tím menší je šířka $\Delta\omega$. Výsledek (37) velice připomíná relace neurčitosti pro dvojici energie-čas (viz odst. II.5.5). Předpokládejme, že chceme měřit rozdíl energií $E_f - E_i = \hbar\omega_{f1}$ tak, že na soustavu necháme působit poruchové pole se "sinusovou" závislostí (26a) a budeme měnit ω až zaregistrujeme rezonanci. Jestliže potom bude porucha působit po dobu t , bude neurčitost ΔE určení rozdílu $E_f - E_i$ podle (37) řádu

$$\Delta E = \hbar \Delta\omega \approx \frac{\hbar}{t} \quad (38)$$

Odtud je zřejmé, že součin $t \Delta E$ nemůže být menší než \hbar .

Konečně je ještě třeba se zabývat otázkou, do jaké míry jsou provedené aproximace oprávněné. Nejprve si přitom všimněme zanedbání členu A_+ a potom faktu, že vše počítáme v aproximaci 1.řádu.

Srovnajme absolutní hodnoty A_+ a A_- . Průběh funkce $|A_-(\omega)|^2$ je v obr.55.

Protože $|A_+(\omega)|^2 = |A_-(-\omega)|^2$, můžeme $|A_+(\omega)|^2$ získat tak, že nakreslíme $|A_-(\omega)|^2$ symetricky vzhledem k $\omega = 0$. Jestliže maxima těchto dvou křivek jsou v mnohem větší vzdálenosti než je $\Delta\omega$, potom je evidentní, že modul A_+ je v bodě $\omega \approx \omega_{f1}$ zanedbatelný vzhledem k $|A_-|$. Zanedbání členu A_+ je tedy oprávněné, jestliže

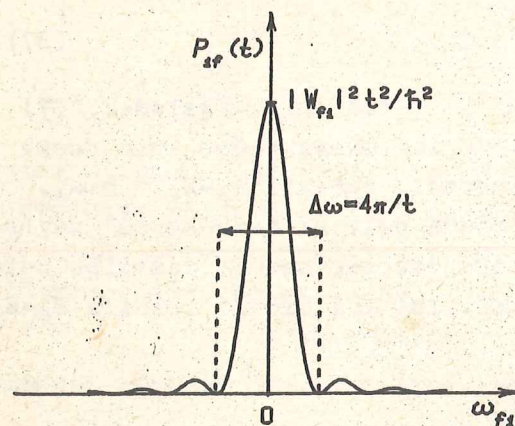
$$2|\omega_{f1}| \gg \Delta\omega \quad (39)$$

což spolu s (37) dá

$$t \gg \frac{1}{|\omega_{f1}|} \approx \frac{1}{\omega} \quad (40)$$

Formule (35) pro P_{if} tedy dobře platí pouze tehdy, jestliže doba po níž působí "sinusová" porucha je velká ve srovnání s ω^{-1} . Fyzikální význam této podmínky je jasný: během intervalu $\langle 0, t \rangle$ musí porucha realizovat mnoho oscilací, aby se to na soustavě projevilo jako "sinusová" porucha. Jestliže, z druhé strany, bude t malé ve srovnání s ω^{-1} , nebude mít porucha čas projeviti svůj oscilační charakter a bude téměř ekvivalentní poruše měnící se lineárně s časem (v případě (26a)) nebo poruše v čase konstantní (v případě (26b)).

Pro časově konstantní poruchu nemůže být podmínka (40) ovšem nikdy splněna, neboť $\omega = 0$. Není však obtížné modifikovat předcházející úvahu na tento případ. Poruchu nezávislou na čase jsme dostali tak, že jsme v (29b) položili $\omega = 0$. Všimněte si, že v tomto případě $A_+ = A_-$, což znamená, že při splnění podmínky (40) není "antirezonanční" člen zanedbatelný. Závislost pravděpodobnosti přechodu P_{if} na energiové diferenci $\hbar\omega_{f1}$ (pro pevné t) je v obr.56. Maximum této křivky je v bodě $\omega_{f1}=0$, což je ve shodě s tím, co jsme zjistili: je-li $\omega = 0$, objeví se "rezonance" při $\omega_{f1}=0$ (musí jít o degenerovanou hladinu s $E_f=E_i$).



Konstantní porucha

Obr.56

Závislost P_{if} na $\omega_{f1} = (E_f - E_i) / \hbar$ pro pevné t a poruchu nezávislou na čase. Rezonance se objevuje při $\omega_{f1} = 0$ (zákon zachování energie) se stejnou šířkou $\Delta\omega$ jako v obr.55, ale "intenzitou" 4x větší (je to důsledkem "konstruktivní" interference A_+ a A_- , které se v tomto případě rovnají).

Zvažme nyní ještě meze použitelnosti výpočtů P_{if} v aproximaci 1.řádu. Předně si uvědomme, že nestačí požadovat aby porucha byla malá. Uvidíme to např. na výrazu (35), jestliže ho napíšeme pro $\omega = \omega_{f1}$:

$$P_{if}(t; \omega = \omega_{f1}) = \frac{|w_{f1}|^2}{4 \hbar^2} t^2 \quad (41)$$

Pro $t \rightarrow \infty$ dostáváme absurdní výsledek $P_{if} \rightarrow \infty$, zatímco víme, že P_{if} musí být vždy menší než 1.

Rozumné praktické kritérium pro použitelnost 1.aproximace spočívá v tomto případě v požadavku $P_{if} \ll 1$, tj.

$$t \ll \frac{\hbar}{|w_{f1}|} \quad (42)$$

Zpravidla bude třeba ještě požadovat, aby podmínka (42) byla kompatibilní s požadavkem (40). Pak musí platit

$$\frac{1}{|\omega_{f1}|} \ll \frac{\hbar}{|w_{f1}|} \quad (43)$$

což znamená, že energiový rozdíl $|E_f - E_i| = \hbar|\omega_{f1}|$ je mnohem větší než maticový prvek $|w_{f1}|$ (obdobná podmínka vystupovala ve stacionárním poruchovém počtu).

V případě, že podmínka (42) není splněna, je vhodné zvolit jiný postup řešení než pracně počítat korekce vyšších řádů v rozvoji (15). Vychází se přitom z toho, že při rezonanci $\omega \approx \omega_{f1}$ jsou poruchou $W(t)$ vázány prakticky jen stavy ψ_i, ψ_f . Pravděpodobnost přechodu do ostatních stavů je zanedbatelná. Pak je ale možné volit postup blízký tomu, který nás v odst. V.2.3 přivedl k Rabiho formulí. Takto se např. také řeší úloha o elektronové spinové rezonanci.

3.3) Přechod do kontinua stavů

Patří-li energie E_f do spojité části spektra hamiltoniánu \mathcal{H}_0 (koncové stavy jsou "indexovány" spojitě se měnící proměnnou), nelze mluvit o pravděpodobnosti nalezení soustavy v přesně definovaném stavu ψ_f v čase t . Z kap.IV, odst.2 víme (viz (IV.77)), že v tomto případě bude veličina $|\langle \psi_f | \psi(t) \rangle|^2$ představovat hustotu pravděpodobnosti.

Hodnotu, kterou chceme srovnávat s experimentem, pak získáme integrací přes odpovídající skupinu možných koncových stavů (integrační proměnná by byla f). Objasněme si to nejprve na příkladě.

Konkrétní příklad : rozptyl částice

Předpokládejme, že studujeme rozptyl částice s hmotností m na potenciálu $W(r)$ (spin neuvažujeme). Vlnovou funkci částice $\psi(t)$ v čase t můžeme rozvinout podle rovinných vln (II.35), resp.(D12)

$$\psi_{\vec{p}}(r) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar} \quad (44)$$

Každé z těchto vln odpovídá stav s přesně určeným impulsem \vec{p} a energií

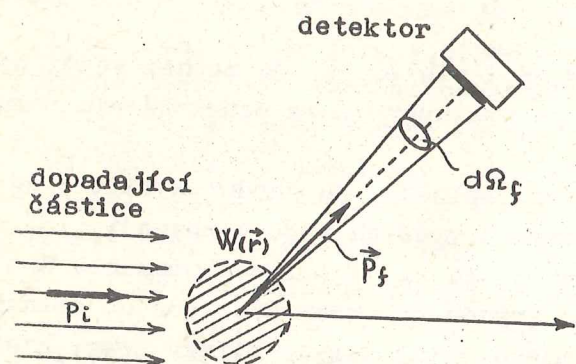
$$E_{\vec{p}} = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (45)$$

Hustota pravděpodobnosti naměření impulsu \vec{p} ve stavu $\psi(t)$ je

$$|\langle \psi_{\vec{p}} | \psi(t) \rangle|^2 \quad (46)$$

Detektor použitý pro sledování rozptylu (obr.57) má však konečnou úhlovou aperturu a jeho citlivost na energii dopadajících částic také není dokonalá; tzn., že bude registrovat částici vždy, když její impuls \vec{p} bude ležet v prostorovém úhlu $d\Omega_f$ kolem směru vektoru \vec{p}_f a energie částice bude v nějakém intervalu δE_f kolem bodu $E_f = \vec{p}_f^2/2m$. Označíme-li D_f oblast \vec{p} -prostoru která splňuje tyto podmínky, potom pravděpodobnost, že detektor zaregistruje částici bude

$$\delta P(\vec{p}_f, t) = \int_{D_f} d^3\vec{p} |\langle \varphi_p | \psi(t) \rangle|^2 \quad (47)$$



Obr.57

Částice přicházející s daným impulsem \vec{p}_i do oblasti působení potenciálu $W(\vec{r})$ se s určitou pravděpodobností rozptýlí do prostorového úhlu $d\Omega_f$ kolem \vec{p}_f , v němž je detektor schopen registrovat dopad částic.

Rozptyl částice může být pružný (její energie se nemění), takže se mění pouze její impuls (stav). Takovéto měření je příkladem přechodu částice z daného stavu \vec{p}_i do kontinua stavů \vec{p}_f . Přestože $W(\vec{r})$ nezávisí na čase, lze úlohu řešit poruchovým počtem závislým na čase, neboť potenciál $W(\vec{r})$ působí na částici pouze v určitém časovém intervalu, když prochází vyznačenou oblastí.

Abychom mohli užít výsledky z předchozího odstavce, musíme přejít k integraci přes energii E . Provedeme to snadno, když si uvědomíme, že je možné psát (jde o přechod ke sférickým souřadnicím v \vec{p} -prostoru; srov. (VIII.5))

$$d^3\vec{p} = p^2 dp d\Omega \quad (48)$$

a za p dosadíme z (45). Potom

$$d^3\vec{p} = \varrho(E) dE d\Omega \quad (49)$$

kde $\varrho(E)$ je hustota koncových stavů rovná (z(45)+(48)+(49))

$$\varrho(E) = p^2 \frac{dp}{dE} = p^2 \frac{m}{p} = m\sqrt{2mE} \quad (50)$$

Výraz (47) pak je

$$\delta P(\vec{p}_f, t) = |\langle \varphi_p | \psi(t) \rangle|^2 \cdot \varrho(E) dE d\Omega \quad (51)$$

Obecná formulace.

Sformulujeme nyní získané výsledky v obecné formě. Nechť určitá část spektra \mathcal{H}_0 je spojitá a odpovídající stavy $\psi(k)$ jsou rozlišovány spojitě se měnící proměnnou k . Ortonormalizační podmínka pro stavy $\psi(k)$ je (srov.(IV.79))

$$\langle k | k' \rangle \equiv \langle \psi(k) | \psi(k') \rangle = \delta(k-k') \quad (52)$$

Stav soustavy s hamiltoniánem $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + W$ je v čase t určen normalizovanou vlnovou funkcí $\psi(t)$. Úkolem je určit pravděpodobnost $\delta P(k_f, t)$, že soustava bude nalezena v dané množině koncových stavů D_f kolem hodnoty k_f za předpokladu, že energie příslušející těmto stavům se mění spojitě. Z postulátů kvantové mechaniky (viz odst.IV.2) plyne, že

$$\delta P(k_f, t) = \int_{D_f} |\langle \psi(k) | \psi(t) \rangle|^2 dk \quad (53)$$

Stejně jako v předchozím příkladu, přejdeme od k k proměnné E , doplněné podle potřeby o další parametry - označme je souhrnně β - nutné k úplnému určení stavu (srov. $d\Omega$ v předcházejícím příkladu). Element dk vyjádříme takto

$$dk = \varrho(\beta, E) d\beta dE, \quad (54)$$

čímž také zavedeme hustotu koncových stavů $\varrho(\beta, E)$ (velice často, stejně jako v uvedeném příkladu, závisí ϱ pouze na E). Označíme-li ještě $\delta\beta_f$ a δE_f intervaly v nichž jsou hodnoty β a E z oblasti D_f , máme

$$\delta P(k_f, t) = \int_{\substack{\beta \in \delta\beta_f \\ E \in \delta E_f}} |\langle \psi(\beta, E) | \psi(t) \rangle|^2 \varrho(\beta, E) dE d\beta \quad (55)$$

3.4) Fermiho zlaté pravidlo

V závěrech předchozího odstavce figuruje přesná vlnová funkce $\psi(t)$. Vyjádříme nyní získané výsledky opět v aproximaci 1.řádu. Výchozí stav soustavy (před působením poruchy) bude odpovídat opět diskretnímu stavu ψ_1 hamiltoniánu \mathcal{H}_0 . Abychom tuto skutečnost zdůraznili, budeme místo $\delta P(k_f, t)$ psát $\delta P(\psi_1, k_f, t)$.

Uvažujme nejdříve poruchu konstantní v daném časovém intervalu. Pro ni jsme, v případě přechodu mezi dvěma diskretními stavy, obdrželi výsledek (30), který zůstává v platnosti i pro spojitě se měnící koncové stavy. Podle (30) tudíž platí v aproximaci 1.řádu

$$|\langle \psi(\beta, E) | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \psi(\beta, E) | W | \psi_1 \rangle|^2 F\left(t, \frac{E-E_1}{\hbar}\right) \quad (56)$$

kde E je energie ve stavu $\psi(\beta, E)$, E_1 je energie v počátečním stavu ψ_1 a funkce F je definována výrazem (31).

Pro pravděpodobnost $\delta P(\psi_1, k_f, t)$ tak dostáváme

$$P(\psi_1, k_f, t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{\substack{\beta \in \delta\beta_f \\ E \in \delta E_f}} |\langle \psi(\beta, E) | W | \psi_1 \rangle|^2 \rho(\beta, E) F\left(t, \frac{E-E_1}{\hbar}\right) \quad (57)$$

Jedna z možných reprezentací δ -funkce (neúvedená v dod.C) je

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \frac{\epsilon}{\pi} \frac{\sin^2(x/\epsilon)}{x^2}$$

Porovnáme-li ji s (31), vidíme, že pro velká t ($1/\epsilon = t$, $t \rightarrow \infty$) se bude funkce F chovat jako δ -funkce (při úpravě použijeme ještě (C10))

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F\left(t, \frac{E-E_1}{\hbar}\right) = \pi t \delta\left(\frac{E-E_1}{2\hbar}\right) = 2\pi\hbar t \delta(E-E_1) \quad (58)$$

Z druhé strany, funkce $|\langle \psi(\beta, E) | W | \psi_1 \rangle|^2 \rho(\beta, E)$ se obecně mění, v závislosti na E , mnohem pomaleji. Budeme předpokládat t tak velké, že v intervalu $4\pi\hbar/t$ se středem v $E=E_1$ (obr.56), bude možné pokládat tuto funkci za konstantní. Jestliže potom nahradíme $F(t, (E-E_1)/\hbar)$ v (57) δ -funkcí podle (58), můžeme výsledek integrace přes E napsat okamžitě (viz (C7)). Když navíc bude $\delta\beta_f$ velmi malé, nemusíme provádět integraci přes β (v integrandu nahradíme β hodnotou β_f , vytkneme a $\int_{\delta\beta_f} d\beta$ dá $\delta\beta_f$). Tak nakonec obdržíme výsledek

$$\delta P(\psi_1, k_f, t) = \delta\beta_f \frac{2\pi}{\hbar} t |\langle \psi(\beta_f, E_f=E_1) | W | \psi_1 \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f=E_1) \quad (58)$$

pro energii E_1 z δE_f

$$\delta P(\psi_1, k_f, t) = 0 \quad \text{pro } E_1 \text{ vně intervalu } \delta E_f$$

Skutečnost, že časově konstantní porucha může indukovat pouze přechody do stavů se stejnou energií (přesněji: ještě $\pm 2\pi\hbar/t$) jsme již zaznamenali (viz např. obr.56).

Pravděpodobnost (58) roste lineárně s časem. Vypočteme-li pravděpodobnost přechodu za jednotku času jako

$$\frac{d}{dt} \delta P(\psi_1, k_f, t), \quad (59)$$

bude konstantní. Obdobně se spočte pravděpodobnost připadající na jednotkový interval proměnné β_f .

Hustota pravděpodobnosti přechodu za jednotku času a na jednotkový interval proměnné β_f tedy je ($\langle \beta, E | \equiv \psi(\beta, E)$)

$$w(\psi_1, k_f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \beta_f, E_f=E_1 | W | \psi_1 \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f=E_1) \quad (60)$$

Formule (60) byla odvozena pro časově konstantní poruchu. Její použití je tak široké, že ji E.Fermi nazval zlatým pravidlem. Později se začala uvádět jako Fermiho zlaté pravidlo.

Závisí-li W na čase periodicky podle (26), váže taková porucha mezi sebou stavy ψ_1 a stavy z oblasti kontinua $\psi(\beta_f, E_f)$, jejichž energie E_f je blízká k $E_1 + \hbar\omega$ (absorpce; pro emisi $E_1 - \hbar\omega$). Vyjdeme-li z (35), dovede nás stejný postup k výsledku

$$w(\psi_1, k_f) = \frac{\pi}{2\hbar} |\langle \beta_f, E_f=E_1+\hbar\omega | W | \psi_1 \rangle|^2 \rho(\beta_f, E_f=E_1+\hbar\omega) \quad (61)$$

Při praktických výpočtech pravděpodobnosti přechodu ze stavu ψ_1 do stavu ψ_f se zpravidla začíná výpočtem maticového prvku $\langle \psi_f | W | \psi_1 \rangle$. Často se totiž dá ukázat (většinou bez počítání, pouze na základě symetrie soustavy s využitím závěrů teorie grup), že tento maticový prvek je roven nule. Potom se říká, že přechod je zakázaný (ovšem v aproximaci 1.řádu!; ve vyšších aproximacích může vycházet pravděpodobnost přechodu nenulová, vždy však bude menší než hodnoty vycházející v 1.řádu, takže např. příslušné čáry ve spektru budou slabé). Takovýmto způsobem se také získávají známá výběrová pravidla s nimiž se setkáme i v následující kapitole.